

ПРОТОКОЛ № 14

онлайн-заседания диссертационного совета Д 004.002.01
при Институте высокотемпературной электрохимии УрО РАН

от 17 декабря 2020 г.

ПРИСУТСТВОВАЛИ: д. хим.наук, профессор Зайков Юрий Павлович, к. хим.наук Кулик Нина Павловна, д. хим.наук, доцент Анимица Ирина Евгеньевна, д. хим.наук Бронин Дмитрий Игоревич, д. физ.-мат.наук Галашев Александр Евгеньевич, д. хим.наук Елшина Людмила Августовна, д. хим.наук, доцент Закирьянова Ирина Дмитриевна, д. хим.наук, доцент Зуев Андрей Юрьевич, д. хим.наук Курумчин Эдхем Хурьятбекович, д. хим.наук, профессор Лебедев Владимир Александрович, д. хим.наук, профессор РАН Новоселова Алена Владимировна, д. хим.наук, профессор Останина Татьяна Николаевна, д. техн.наук, доцент Потапов Алексей Михайлович, д. хим.наук, профессор Ребрин Олег Иринархович, д. хим.наук, профессор Рудой Валентин Михайлович, д. хим.наук Смоленский Валерий Владимирович, д. хим.наук Ткачев Николай Константинович, д. хим.наук Филатов Евгений Сергеевич, д. хим.наук, профессор Хохлов Владимир Антонович, д. хим.наук, профессор Черепанов В.А., д. хим.наук Шкерин Сергей Николаевич – всего 21 человек из 26 членов совета.

СЛУШАЛИ: председателя комиссии диссертационного совета Галашева А.Е. о диссертационной работе Закирьянова Дмитрия Олеговича на тему «Неэмпирические расчеты температур плавления, коэффициентов теплопроводности и локальной структуры галогенидных и оксигалогенидных расплавов». Работа выполнена в лаборатории расплавленных солей им. М.В.Смирнова ИВТЭ УрО РАН и представлена на соискание степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия». Руководитель – доктор химических наук Ткачев Николай Константинович.

Комиссия в составе членов диссертационного совета Галашева А.Е., Филатова Е.С., Рудого В.М. считает:

1. Диссертация соответствует профилю совета и паспорту заявленной специальности 02.00.04 – «Физическая химия», химические науки. Согласно формуле специальности, в работе проведено теоретическое исследование «количественных взаимодействий между химическим составом, структурой и свойствами» галогенидных и оксигалогенидных расплавов. В соответствии с п. 4, «межчастичные взаимодействия» всех пар ионов в галогенидах щелочных металлов, а также в любых их смесях, параметризованы для потенциала Борна-Майера. Согласно п. 5, проведено изучение теплопроводности галогенидов щелочных металлов и особенностей локальной структуры галогенидных и оксигалогенидных расплавов свинца и гадолиния «в экстремальных условиях высоких температур». При этом теплопроводность изучали с привлечением неравновесной молекулярной динамики, что соответствует п. 6 «Неравновесные процессы, потоки массы, энергии и энтропии пространственных и временных структур в неравновесных системах». Кроме того, проведенные расчеты температур ликвидуса отвечают п. 7. «Растворение и кристаллизация».

2. Личный вклад автора состоит в разработке схем моделирования, апробации параметров расчета и проведении расчетов параметров парных потенциалов, коэффициентов теплопроводности, а также всех расчетов методом квантовой молекулярной динамики. Постановку целей и задач исследования, анализ и обсуждение результатов проводили совместно с научным руководителем д.х.н. Н.К. Ткачевым. В расчетах температур плавления и параметров парных потенциалов участвовал к.х.н. М.А. Кобелев.

3. Основные результаты диссертационной работы достаточно полно отражены в 8 статьях в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК, и тезисах 5 докладов на российских и международных конференциях.

4. Результаты работы апробированы на 1 российской и 3 международных конференциях.

5. Текст диссертации представляет собой самостоятельную научно-квалификационную работу, не содержит заимствованного материала без ссылки на автора и (или) источник заимствования. Степень оригинальности текста диссертации, определённая с помощью системы «РУКОНТЕСТ», составляет 97.3 %. При этом 2.5 из обнаруженных 2.7% заимствований приходится на размещенный в сети Интернет доклад по итогам научной работы соискателя Д.О. Закирьянова. Остальные 0.2% заимствований составляют часто употребляемые во введениях диссертаций формулировки, в частности, описывающие статистические данные (количество публикаций, структуру работы).

6. Результаты работы обладают научной новизной и практической значимостью. Диссертация удовлетворяет требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 с изменениями Постановления Правительства РФ от 21 апреля 2016 г. № 335) и может быть представлена к защите в нашем совете.

7. **В качестве ведущей организации рекомендуется** Федеральное государственное бюджетное учреждение науки *Институт химии твердого тела УрО РАН*. Сотрудники лаборатории квантовой химии и спектроскопии им. профессора А.Л. Ивановского этого Института под руководством доктора химических наук М.В. Кузнецова исследуют электронную структуру и свойства конденсированных сред, применяя первопринципные методы моделирования. Накоплен богатый опыт проведения расчетов методом теории функционала электронной плотности.

Список публикаций сотрудников ведущей организации, наиболее близких к тематике диссертационного исследования, приведен ниже:

1. M.N. Kozlova, A.N. Enyashin, E.D. Grayfer, V.A. Kuznetsov, P.E. Plyusnin, N.A. Nebogatikova, V.I. Zaikovskii, V.E. Fedorov / A DFT study and experimental evidence of the sonication-induced cleavage of molybdenum sulfide Mo_2S_3 in liquids // Journal of Material Chemistry C. – 2017. – V. 5. – P. 6601–6610.

2. E.V. Anikina, I.A. Balyakin, V.P. Beskachko / Importance of Atomic-Like Basis Set Optimization for DFT Modelling of Nanomaterials // South Ural State University Bulletin: Mathematics. Mechanics. Physics. – 2019. – V. 11. – P. 44–50.

3. S.A. Dalmatova, A.D. Fedorenko, L.N. Mazalov, I.P. Asanov, A.Yu. Ledneva, M.S. Tarasenko, A.N. Enyashin, V.I. Zaikovskii, V.E. Fedorov / XPS experimental and DFT investigations on solid solutions of $\text{Mo}_{1-x}\text{Re}_x\text{S}_2$ ($0 < x < 0.20$) // Nanoscale. – 2018. – V. 10. – P. 10232–10240.

4. А.Г. Краснов, И.Р. Шеин, И.В. Пийр / Экспериментальное исследование и ab initio расчет свойств Sc-, In-допированных титанатов висмута со структурой типа пироклора // Физика твердого тела. – 2017. – Т.59. – № 3. – С. 483–490.

5. I.S. Popov, A.N. Enyashin, A.A. Rempel / Size dependent content of structural vacancies within TiO nanoparticles: Quantum-chemical DFTB study // Superlattices and Microstructures. – 2018. – V. 113. – P. 459–465.

6. A.V. Serdtsev, S.F. Solodovnikov, N.I. Medvedeva / Sodium diffusion and redox properties of alluaudite $\text{Na}_{2+2x}\text{M}_{2-x}(\text{MoO}_4)_3$ ($\text{M}=\text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}$) from DFT+U study // Materials Today Communications. – 2020. – V. 22. – P. 100825.

8. В качестве официальных оппонентов рекомендуются:

1. **Рыльцев Роман Евгеньевич** - доктор физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, доцент, старший научный сотрудник

лаборатории аналитической химии ФГБУН Института металлургии УрО РАН (г. Екатеринбург). Рыльцев Р.Е. является специалистом в области теоретических исследований структуры и динамических свойств топологически неупорядоченных систем методами статистической термодинамики и молекулярной динамики.

Список публикаций, наиболее близких к тематике диссертации, приведен ниже:

1. **R.E. Ryltsev**, N.M. Chtchelkatchev / Polytetrahedral short-range order and crystallization stability in supercooled $\text{Cu}_{64.5}\text{Zr}_{35.5}$ metallic liquid // Journal of Crystal Growth. – 2020. – V. 531. – P. 125374.
2. L.V. Kamaev, **R.E. Ryltsev**, V.I. Lad'yanov, N.M. Chtchelkatchev / Viscosity, undercoolability and short-range order in quasicrystal-forming Al-Cu-Fe melts // Journal of Molecular Liquids Volume. – 2020. – V. 299. – P. 112207.
3. R. M. Khusnutdino, A. V. Mokshin, B. A. Klumov, **R. E. Ryltsev**, and N. M. Chtchelkatchev / Structural features and the microscopic dynamics of the threecomponent $\text{Zr}_{47}\text{Cu}_{46}\text{Al}_7$ system: Equilibrium melt, supercooled melt, and amorphous alloy // JETP. – 2016. – V. 123. – P. 265–276.
4. L.V. Kamaeva, **R.E. Ryltsev**, A.A. Suslov, N.M. Chtchelkatchev / Effect of copper concentration on the structure and properties of Al-Cu-Fe and Al-Cu-Ni melts // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2020. – V. 32. – P. 224003.
5. **R.E. Ryltsev**, L.D. Son, K.Yu. Shunyaev / Liquid-Gas Equilibrium in Nanoparticle Network-Forming Systems // JETP Letters. – 2018. – V. 108. – P. 627–632.

2. Марков Вячеслав Филиппович - доктор химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, профессор, заведующий кафедрой физической и коллоидной химии химико-технологического института ФГАОУ ВО «Уральский федеральный Университет им. первого президента России Б.Н. Ельцина» (УрФУ), г. Екатеринбург. Марков В.Ф. является специалистом в области химических равновесий в растворах и химической кинетики. Список публикаций, наиболее близких к тематике диссертации, приведен ниже:

1. А.А. Халилова, А.С. Мальцев, С.А. Бахтеев, Р.А. Юсупов, З.Т. Динь, Е.А. Федорова, Л.Н. Маскаева, **В.Ф. Марков** / Модель и программа расчета фазообразования в водных растворах солей металлов // Журнал физической химии. – 2019. – Т. 93. – № 5. – С. 678–684.
2. Е.В. Иканина, **В.Ф. Марков** / Математическое моделирование ионных равновесий железа(III) для извлечения из сульфатных растворов тяжелых цветных металлов // Теоретические основы химической технологии. – 2017. – Т. 51. – № 1. – С. 51–57.
3. Е.А. Федорова, С.А. Бахтеев, Л.Н. Маскаева, Р.А. Юсупов, **В.Ф. Марков** / Моделирование равновесных процессов в системе $\text{Ga}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O-NaOH}$ // Журнал физической химии. 2016. Т. 90. № 6. С. 944-949.
4. А.Ю. Чуфаров, Н.В. Мельникова, Н.В. Зарубина, А.Н. Ермаков, Э.Г. Вовкотруб, Л.Н. Маскаева, **В.Ф. Марков**, Ю.Г. Зайнулин / Образование твердых растворов в системе CdSe-PbSe под действием высоких давлений и температур // Журнал неорганической химии. – 2016. – Т. 61. – № 8. – С. 1063–1069.
5. N.A. Forostyanaya, A.D. Kutyavina, M.A. Ponomareva, A.A. Rozhina, P.O. Mihnevich, L.N. Maskaeva, **V.F. Markov** / Ligand background of the reaction mixture as a factor of the CdS-PbS thin films formation by chemical bath deposition // European Reviews of Chemical Research. – 2016. – V. 8. – P. 59–66.

ПОСТАНОВИЛИ («за» - 20 голосов, «против» - 0, «воздержались» – 1):

- Принять диссертацию Закирьянова Д.О. к защите.

- Назначить официальными оппонентами:

1. **Маркова Вячеслава Филипповича** - доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, профессора, заведующего кафедрой физической и коллоидной химии

Химико-технологического института ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет им. первого президента России Б.Н. Ельцина»

2. **Рыльцева Романа Евгеньевича** - доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, доцента, старшего научного сотрудника лаборатории аналитической химии ФГБУН Института металлургии УрО РАН.

- Назначить ведущей организацией по защите ФГБУН **Институт химии твердого тела УрО РАН (г. Екатеринбург)**.

- Утвердить дату защиты диссертации **24 февраля 2021 г., 13.00**.

- Разрешить публикацию автореферата диссертации в количестве 100 экземпляров.

- Утвердить список адресов для рассылки автореферата.

Председатель диссертационного совета

Ученый секретарь диссертационного совета



Ю.П.Зайков

Н.П.Кулик