ОТЗЫВ НА КАНДИДАТСКУЮ ДИССЕРТАЦИЮ

ЗАКИРЬЯНОВА ДМИТРИЯ ОЛЕГОВИЧА

«НЕЭМПИРИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ТЕМПЕРАТУР ПЛАВЛЕНИЯ, КОЭФФИЦИЕНТОВ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ЛОКАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ГАЛОГЕНИДНЫХ И ОКСИГАЛОГЕНИДНЫХ РАСПЛАВОВ»

Неэмпирические методы расчетов широко применяются в научных исследованиях. Большую ценность такие расчеты имеют при анализе свойств высокотемпературных расплавов, для которых проведение эксперимента, порой, является неразрешимой задачей. Центральное место в диссертационной работе Закирьянова Д.О. занимает неэмпирические расчеты физико-химических свойств расплавленных галогенидов щелочных металлов свинца и гадолиния. Им предложено универсальное соотношение для расчета коэффициента теплопроводности вблизи температуры плавления галогенидов щелочных металлов, показана возможность оценки локальной структуры и характеристических линий колебательных спектров галогенидных кластеров кальция, свинца и гадолиния.

По содержанию автореферата есть замечания:

1. При расчете температур плавления в расплавленных галогенидах щелочных металлов использовался потенциал Борна-Майера. Параметр δ в него не входит. Физический смысл этого параметра неясен, особенно при анализе проблем «порядок-беспорядок»
2. Положение характеристической частоты нанокластера свинца составляет ~192см$^{-1}$. Это значение не совпадает с максимумами плотности колебательных состояний ионов в расплаве $PbCl_2$. Как это объяснить?

Новизна полученных результатов не вызывает сомнений. Достоверность и обоснованность выводов в диссертации базируется на использовании адекватных целей методов расчета, а также объективной оценкой литературных данных.

Материалы диссертации обсуждались на престижных международных и российских конференциях. Лично диссертант внес вклад в высокотемпературную физическую химию расплавленных солей. Диссертационная работа Закирьянова Д.О. является законченным научным исследованием, которая соответствует положениям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Закирьянов Д.О. заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности «Физическая химия - 02.00.04»

В.н.с. Хохряков А.А. Специальность по защите «Физическая химия 02.00.04 »

Подпись Хохрякова А.А. заверяю

Ученый секретарь ИМЕТ УрО РАН к.х.н. Долматов А.В.

10.02.2021

Сведения о рецензенте:

Хохряков Александр Александрович, доктор химических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории физической химии металлургических расплавов Института металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург.

620016 Екатеринбург, ул. Амундсена, 101.

Телефон: (343) 232-90-60.

Адрес электронной почты: xoxryakov46@mail.ru