

Отзыв на автореферат диссертации

на соискание степени кандидата химических наук Закирьянова Дмитрия Олеговича
на тему «Неэмпирические расчеты температур плавления, коэффициентов
теплопроводности и локальной структуры галогенидных и оксигалогенидных расплавов»,
специальность: 02.00.04 – физическая химия.

Диссертационная работа Д.О. Закирьянова посвящена актуальной проблеме – неэмпирическим расчетам физико-химических свойств расплавов. В работе проведена теоретическая интерпретация изменения температур плавления и коэффициентов теплопроводности галогенидов щелочных металлов. Исследована локальная структура галогенидных и оксигалогенидных расплавленных систем с двух- и трехвалентными катионами кальция, свинца и гадолиния. Теоретическая интерпретация хорошо подтверждается рядом экспериментальных данных – по температурам плавления и коэффициентам теплопроводности для нескольких десятков соединений. Проведенное *ab initio* моделирование структуры и фононных спектров наноразмерных кластеров хлоридов кальция и свинца хорошо воспроизводит измеренный спектр и позволяет интерпретировать экспериментальные данные.

Одним из безусловных достоинств работы является получение из *ab initio* расчета параметров парных потенциалов (в форме Борна-Майера) для галогенидов щелочных металлов. Это открывает широкие возможности для моделирования сложных структур на их основе – кластеров, конгломератов кластеров, твердых растворов и т.д., расчет которых непосредственно из первых принципов потребовал бы непомерно больших затрат компьютерных ресурсов.

Параметров парных взаимодействий, полученных из *ab initio*, в научной печати крайне мало. Полученные в работе параметры парных взаимодействий для щелочных металлов будут востребованы другими исследователями. Надо отметить, что параметры парных взаимодействий, полученные в работе из *ab initio*, не только успешно воспроизводят ряд экспериментальных данных различного характера, но и попадают в характерный для них диапазон значений, что также говорит об их адекватности.

Положения, вынесенные на защиту, хорошо обоснованы. Результаты работы представлены в 6-ти статьях, на которые в настоящее время уже имеются ссылки зарубежных авторов.

Работа выполнена на высоком уровне и вносит вклад в методiku современных квантово-химических расчетов.

Отмечу, что автореферат диссертации хорошо изложен.

В качестве замечания могу высказать следующее: в тексте автореферата не упоминается название программы, использованной для abinitio расчетов, не обсуждаются её возможности.

Сформулированное замечание автореферату ни в коей мере не снижает высокой оценки работы. Считаю, что диссертационная работа Закирьянова Дмитрия Олеговича полностью удовлетворяет требованиям п.9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а ее автор, Закирьянов Д.О. безусловно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

кандидат физико-математических наук, доцент,
доцент кафедры физики конденсированного состояния
и наноразмерных систем
Института естественных наук и математики,
ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»

Чернышев Владимир Артурович

Дата: 18 января 2021 г.

620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19
Тел.: +7 (343) 3754444
e-mail: Vladimir.Chernyshev@urfu.ru

Подпись к.ф.-м.н., доцента ФГАОУ ВО «Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» Чернышева В.А. заверяю.



ДОКУМЕНТОВЕД УДИОВ
ГАФУРОВА А. А.