

## ОТЗЫВ

на автореферат 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

Расплавленные галогениды щелочных металлов имеют практический интерес как реакционные среды в различных электрохимических процессах, расплавленные галогениды и оксигалогениды свинца и гадолиния могут использоваться как электролиты при разработке технологий переработки свинецсодержащего сырья и получения гадолиния.

Диссертация Закирьянова Д.О. посвящена расчету структурных характеристик и свойств галогенидных и оксигалогенидных расплавов неэмпирическими методами. Хотя многие физико-химические свойства солевых расплавов исследовались ранее, некоторые закономерности изменения свойств в зависимости от структуры и состава расплавов остаются неясными. Использование методов квантовой химии и молекулярной динамики позволяет объяснять экспериментальные результаты, прогнозировать свойства расплавов. Разработка расчетных методов, а также соотнесение экспериментальных результатов с теоретически рассчитанными и вывод соответствующей корреляции между ними, являются актуальными задачами.

Научная новизна диссертационной работы, достоверность результатов и обоснованность выводов, сделанных автором, практическая и теоретическая значимость работы не вызывают никаких сомнений.

В качестве замечания отмечу следующее:

На стр. 11 указано, что «расчет температур плавления ГЦМ ... показал хорошее согласие с экспериментальными данными». Однако расчетная и экспериментальная температуры плавления LiI отличаются более чем на 140К (таблица 3).

Указанное замечание никак не снижает высокой оценки диссертации.

Считаю, что диссертационная работа «Неэмпирические расчеты температур плавления, коэффициентов теплопроводности и локальной структуры галогенидных и оксигалогенидных расплавов» удовлетворяет требованиям п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013г. №842 с изменениями от 21.04.2016г. №335, а сам автор, Закирьянов Дмитрий Олегович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Доктор химических наук, профессор кафедры  
физической и органической химии  
ФГБОУ ВО «Дагестанский  
государственный университет»

Шабанов Осман Мехтевич  
04.02.2021 г

367000, г. Махачкала, ул. М. Гаджиева, 43а.  
Телефон: 8-928-514-40-22  
E-mail: shabanov-osman@rambler.ru



*Handwritten signature: Шабанов Осман Мехтевич*  
*Handwritten signature: Осман Мехтевич Шабанов*  
20.02.21 г.