

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Назипова Д. В. "ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ, КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ И УПРУГИХ СВОЙСТВ НИЗКОСИММЕТРИЧНЫХ КРИСТАЛЛОВ С РЕДКОЗЕМЕЛЬНОЙ ПОДРЕШЕТКОЙ", представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Назипова Д. В. посвящена исследованию из первых принципов кристаллической структуры, колебательных спектров и упругих свойств низкосимметричных кристаллических оксидов  $R_2Si_2O_7$ ,  $R_2SiO_5$  ( $R$  – редкоземельный ион) и  $BiMnO_3$ , представляющих значительный интерес как с теоретической, так и экспериментальной точек зрения. Во многом это связано с тем, что отсутствует последовательная микроскопическая теория таких сложных ионно-ковалентных кристаллов.

В диссертации Назипова Д. В. впервые в рамках первопринципного подхода рассчитан спектр комбинационного рассеяния света (КРС)  $Lu_2Si_2O_7$ ,  $Lu_2SiO_5$ . Полученные результаты подтверждают и дополняют полученные ранее экспериментальные данные. Впервые в рамках первопринципного подхода рассчитаны спектры КРС ряда оксиортосиликатов  $R_2SiO_5$  ( $R = La, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu$ ), рассчитаны упругие модули и предсказаны параметры упругих свойств, акустические параметры и коэффициент теплопроводности. Также впервые в рамках первопринципного подхода рассчитаны спектры ИК и КРС монокристалла  $BiMnO_3$ , предложена идентификация спектров.

В качестве замечания отметим отсутствие данных по g-факторам и основному орбитальному состоянию ионов  $Mn^{3+}$ , используемых при расчете магнитных моментов ионов  $Mn^{3+}$  в соединении  $BiMnO_3$ .

Содержание диссертации Д.В. Назипова полностью отвечает пункту 1 "Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и в том числе материалов световодов как в твердом, так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления" Паспорта научной специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния .

Диссертация Назипова Д. В. представляет собой научно-квалификационную работу, в которой получены новые результаты. По актуальности темы исследования, научной новизне, практической значимости и достоверности полученных результатов, обоснованности выводов и положений, представленная диссертационная работа соответствует требованиям пункта 9 Постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 "О порядке присуждения ученых степеней" (с изменениями, внесенными Постановлением Правительства РФ от 21 апреля 2016г. № 335), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Назипов Дмитрий Валерьевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния .

Ведущий научный сотрудник лаборатории статики и кинетики процессов ФГБУН Институт металлургии УрО РАН,  
доктор физ.-мат. наук

620016 г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101  
[uyam@mail.ru](mailto:uyam@mail.ru)  
+7 (343) 232-91-56

Подпись доктора физ.-мат.наук В.Я.Митрофанова заверяю.  
Ученый секретарь Института металлургии УрО РАН,  
кандидат химических наук  
18.04.2019.

Валентин Яковлевич Митрофанов



Долматов А.В.