

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Назипова Дмитрия Валерьевича “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 структурных, колебательных и упругих свойств кристаллов с подрешеткой редкоземельных ионов и низкой симметрией кристаллической решетки, таких как пирросиликат лютеция $\text{Lu}_2\text{Si}_2\text{O}_7$, оксиортосиликаты R_2SiO_5 (R – редкоземельный ион), а также манганит висмута BiMnO_3 . Данные кристаллы

Актуальность темы исследования обусловлена широкой распространенностью соединений на основе силикатов и возможностью их применения в качестве оптических матриц, а также термобарьерных покрытий. Данная работа показала, что первопринципные расчеты в рамках теории функционала плотности (ДФТ) могут быть полезны при интерпретации экспериментальных результатов, полученных для данных материалов. Они позволяют дополнить сведения и, в ряде случаев, избавиться от необходимости проведения огромного количества экспериментальных процедур. Разработанный в работе подход может быть применен в дальнейшем для расчета свойств материалов с похожим типом связи и изоструктурных соединений.

В работе показана возможность описания в единой первопринципной модели структурных, колебательных и упругих свойств низкосимметричных кристаллов с редкоземельной подрешеткой $\text{Lu}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ и Lu_2SiO_5 . Впервые рассчитан спектр комбинационного рассеяния света Lu_2SiO_5 и предложена возможность новой интерпретации экспериментального спектра. Впервые в рамках первопринципного подхода рассчитаны спектры комбинационного рассеяния света ряда оксиортосиликатов R_2SiO_5 (R = La-Yb), рассчитаны упругие модули и предсказаны параметры упругих свойств, акустические параметры и коэффициент теплопроводности. Показано, что возможными кандидатами на минимальную теплопроводность среди оксиортосиликатов являются кристаллы La_2SiO_5 , Pr_2SiO_5 . Для соединения $\text{Lu}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ (как впрочем и для Lu_2SiO_5) получено отрицательное значение коэффициента C_{15} , что может

проявится, например, в аномальной температурной зависимости соответствующих параметров решетки.

Интересным результатом работы является карта зарядовой плотности, полученная для соединения ViMnO_3 , на которой хорошо видна ее асимметрия, определяющая ненулевую электрическую поляризацию. К сожалению из текста автореферата не понятно учитывались ли сильные кулоновские корреляции (типичные для оксидов марганца) при расчетах данной системы. Такой учет может быть проведен, например, с помощью GGA+U подхода. Интересно было бы узнать - на сколько учет корреляционных эффектов меняет фононный спектр ViMnO_3 ?

Диссертационная работа представляет собой законченное научное исследование, результаты которого имеют научную значимость. Работа соответствует требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней и удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 01.04.07 - "Физика конденсированного состояния", физико-математические науки, а её автор Назипов Д.В. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по данной специальности.

Стрельцов Сергей Владимирович,
Доктор физико-математических наук, профессор РАН
Главный научный сотрудник лаборатории квантовой наноспинтроники
Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения
РАН
620990, г. Екатеринбург
ул. С. Ковалевской 18
E-mail: streltsov@imp.uran.ru
Тел. +7 343 3783665

Дата 16.04.2019г.

Подпись С.В. Стрельцова заверяю

Ученый секретарь



Иванов И.Ю.

