

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 расчетам в программе CRYSTALL колебательных и упругих свойств кристаллов, таких как пирросиликат лютеция $\text{Lu}_2\text{Si}_2\text{O}_7$, оксиортосиликаты $R_2\text{SiO}_5$ (R – редкоземельный ион), а также манганит висмута BiMnO_3 . Допированные редкоземельными ионами, данные кристаллы используются в качестве сцинтилляторов, лазерных материалов, имеют подходящие параметры для использования в позитронно-эмиссионной томографии, а также в качестве термобарьерных покрытий. В работе использован подход, основанный на теории функционала плотности (ТФП). Данные расчеты полезны при интерпретации экспериментальных данных, исследовании внутренних механических свойств кристаллов, которые, зачастую не возможно получить экспериментальными методами.

В работе проведены расчеты параметров кристаллической структуры, колебательных спектров 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 интерпретация экспериментального спектра. Впервые в приближении функционала плотности рассчитаны спектры комбинационного рассеяния света ряда оксиортосиликатов $R_2\text{SiO}_5$ ($R = \text{La-Yb}$), рассчитаны модули упругости и предсказаны параметры упругих свойств, акустические параметры и коэффициент теплопроводности. Показано, что минимальной теплопроводностью среди оксиортосиликатов обладают кристаллы La_2SiO_5 , Pr_2SiO_5 .

При исследовании магнитоупорядоченной центросимметричной фазы монокристалла BiMnO_3 впервые в единой модели предложена идентификация спектров инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света, воспроизведено наличие дипольного момента в подрешетке ионов висмута и получена величина магнитного момента.

Тем не менее, хотелось бы отметить следующие замечания к работе:

1. Автор в работе использует термин «расчеты из первых принципов», который предполагает отсутствие эмпирических и подгоночных параметров. Кроме того, расчет из первых принципов должен обеспечить асимптотическую сходимость к точному результату. Однако метод функционала плотности содержит главный эмпирический параметр – саму форму функционала и, таким образом расчетом из первых принципов не является

2. В работе не приведены четкие критерии выбора функционала плотности и не сделана оценка ошибки, вносимой в результат от типа выбранного потенциала. Использование эксперимента как критерия выбора типа потенциала является по сути «подгонкой», где тип потенциала является подгоночным параметром
3. В работе использовался смешанный подход, когда функционал плотности «смешивался» с энергией, рассчитанной в приближении КО ЛКАО с использованием разложения по гауссовым орбиталам. Однако не показано достаточность выбранного базиса, не приведены критерии выбора базисного набора. Если в качестве критерия выбора базиса использовался критерий воспроизводимости эксперимента – это также не является «расчетом из первых принципов»
4. Используемый в работе подход, когда отсутствует прямой учет корреляционного взаимодействия электронов, возможен в случае, когда следующий не заселенный электронный уровень находится далеко. Однако в работе не приведены результаты расчетов энергетического расстояния до следующего не заселенного уровня
5. В работе не проведен анализ устойчивости электронной структуры в рамках использованной модели
6. В работе не проведен анализ устойчивости кристаллической структуры, в частности
 - a. Расчет ограничен Γ точкой кристалла
 - b. Не приведены значения наименьших частот и, соответствующие им смещения
7. При расчете кристаллов с включением редкоземельных ионов не проведен анализ возможности пренебрежения релятивистскими эффектами. Не проведено сравнение результатов с расчетами методом неограниченного приближения Хартри-Фока-Рутана (UHF)
8. При расчетах кристалла ViMnO_3 не проведен анализ электронной структуры Mn^{3+} в частности
 - a. Не проведена оценка корреляционного вклада для $3d$ иона, так, для которых возможно малое расщепление основного состояния и сильное взаимодействие с ближними
 - b. Не приведено основное состояние иона марганца в кристалле
 - c. Не проведена оценка наличия эффекта Яна-Теллера и его влияния на колебательный спектр
9. При расчетах интенсивностей спектров КР не проведена оценка влияния на результат переходов на незаполненные орбитали, т.е. корреляционных эффектов.
10. Повсеместно в работе используется термин «Упругие постоянные», хотя было бы более благозвучнее использовать термин «Постоянные упругости»
11. В работе приводятся графики анизотропии модуля Юнга, хотя было бы более практично привести анизотропию скоростей звука, которые легче экспериментально измерять

Несмотря на приведенные замечания, 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.

Попов Сергей Эдуардович,
Кандидат физико-математических наук,
Научный сотрудник лаборатории комплексных методов Института физики
металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН
620990, г. Екатеринбург
ул. С. Ковалевской 18
E-mail: sergeypopov@inbox.ru
Тел.: +7 982 615 78 58



Подпись *Попова С.Э.*
заверяю
Ученый секретарь ИФМ УрО РАН
И.Ю. Арапова
«11» апреля 2019 г.