

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 посвящена актуальной задаче теоретического *ab initio* моделирования физических свойств ряда кристаллов (R_2SiO_5 , $R_2Si_2O_7$ и др.) с низкой симметрией, содержащих редкоземельные ионы. Данные системы вызывают несомненный интерес благодаря своему возможному использованию в качестве оптических матриц, лазерных материалов, в позитронно-эмиссионной томографии. На сегодня в вычислительных методах наметился очевидный прогресс, благодаря использованию все более мощных компьютеров становится возможным за разумное время определять физические параметры сложных систем.

В качестве основного метода исследований автор применил хорошо апробированный программный пакет CRYSTAL, в основе которого лежит теория функционала плотности (DFT). Используются различные гибридные функционалы (PBE0, B3LYP, WC1LYP), что дает возможность сравнить полученные результаты между собой. Достоверность полученных результатов обеспечивается наличием хорошо себя зарекомендовавших методов для различных родственных систем, а также сравнением полученных данных с имеющимися экспериментальными данными.

Автором были получены по известной методике упругие постоянные и модули, коэффициент Пуассона, микротвердость по Виккерсу для оксиортосиликатов R_2SiO_5 , проведены оценки хрупкости/пластичности, параметров анизотропии кристаллов, а также коэффициент теплопроводности. Часть результатов носит предсказательный характер, и может быть использована в дальнейшем при интерпретации свойств родственных соединений. Построена зависимость модуля Юнга от направления для силикатов лютеция. Другим важным результатом являются расчеты спектров комбинационного рассеяния силикатов и проведенный подробный анализ линий частот и классификация полученных мод. Для соединения $ViMnO_3$ проанализировано распределение зарядовой плотности и значения магнитных моментов на атомах Mn для различных состояний.

Диссертация Назипова Д.В. выполнена на высоком научном уровне, все выводы являются логически обоснованными. Результаты работы суммированы в 4 статьях из списка ВАК РФ, рекомендуемым к защитами кандидатских диссертаций, а также доложены на ряде международных и Всероссийских конференций.

К автореферату имеется один вопрос. Упоминается, что для ряда силикатов получаются отрицательные упругие константы. В связи с этим

хотелось бы понять, удовлетворяют ли изучаемые системы критерию механической стабильности кристаллов. Какова погрешность расчетов упругих характеристик?

Считаю, что представленная диссертационная работа по своему объему и выводам в целом соответствует требованиям п. 9, предъявляемым «Положением о присуждении ученых степеней» к диссертациям на соискание ученых степеней, а ее автор, Назипов Дмитрий Валерьевич заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния.

Старший научный сотрудник,
лаборатория квантовой химии и спектроскопии
им. А.Л. Ивановского ИХТТ УрО РАН.
Кандидат физико-математических наук
Суетин Дмитрий Владимирович
620990. Российская Федерация г. Екатеринбург ул. Первомайская д. 91.
E-mail: suetin@ihim.uran.ru, р.т. 8 (343) 362-31-15.
10 апреля 2019 г.

