

Отзыв

на автореферат диссертации Петрова В.П. «**Структурные и колебательные свойства кристаллов с подрешеткой редкоземельных ионов**», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Петрова В.П. посвящена теоретическому изучению структурных, колебательных и упругих свойств многокомпонентных соединений редкоземельных элементов. Основная цель работы - установление на микроскопическом уровне связи спектральных параметров с кристаллической структурой и особенностями электронного строения для широкого круга объектов, включающего титанаты, ферробораты, германаты редкоземельных ионов. Прежде всего, следует подчеркнуть, что огромным преимуществом выполненной работы является использование двух принципиально различных первопринципных методов расчета: метода Хартри–Фока и метода функционала электронной плотности, а также различных приближений для обменно-корреляционного потенциала. Это позволило диссертанту детально исследовать адекватность различных методов и типов обменно-корреляционного потенциала для исследуемых соединений. Диссертантом проведена огромная методическая работа, установлены оптимальные параметры расчетов, обеспечивающие наилучшую точность структурных данных, а также упругих и спектральных свойств.

Изучаемые объекты относятся к классу лантаноидных систем, чьи свойства в значительной степени определяются наличием f -электронов, учет которых в расчетных схемах представляет сложную задачу. Поэтому одним из существенных достижений, отраженных в автореферате, является сопоставление различных схем учета d и f -состояний.

Систематические исследования рядов соединений, выполненные автором, представляются весьма важными, поскольку они позволили установить закономерности в изменении параметров кристаллической структуры, химической связи, колебательных и упругих свойств в зависимости от типа редкоземельного элемента. Диссертантом проведены сложнейшие расчеты фононных спектров, на основе которых дана детальная интерпретация спектров ИК и КР.

Достоверность результатов основывается на применении в диссертации расчетных методов из первых принципов, которые не используют подгоночных параметров, а во-вторых - согласием теоретических результатов, полученных в диссертационной работе, с экспериментальными данными.

Полученные результаты, несомненно, имеют научную и практическую ценность, поскольку в результате проведенных исследований достигнуто понимание свойств основного и возбужденных состояний, а также закономерностей изменения спектральных свойств в зависимости от структуры соединения и типа редкоземельного иона. Большое практическое значение имеют выводы о динамических свойствах германата - перспективной оптической матрицы для создания новых кристаллофосфоров.

В качестве замечания можно отметить отсутствие в автореферате результатов по магнитным свойствам ферроборатов. Однако, отмеченное замечание не умаляет теоретической и практической значимости полученных результатов для этих соединений.

Диссертация выполнена на очень высоком научном уровне с использованием современных методов и подходов теории конденсированного состояния. Результаты работы были неоднократно доложены автором на многочисленных российских и международных научных конференциях и достаточно полно представлены в публикациях в ведущих международных и отечественных журналах. Следует отметить, что количество публикаций диссертанта (14 статей и 35 тезисов докладов) значительно превышает необходимый минимум для защиты кандидатской диссертации.

Актуальность темы, объем работы и новизна полученных в диссертации результатов отвечают требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а ее автор Петров В.П. заслуживает присуждения ему степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

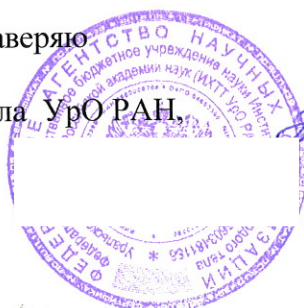
Главный научный сотрудник
лаборатории Квантовой химии и спектроскопии ФГБУН
Институт химии твердого тела УрО РАН,

Доктор физико-математических наук

Медведева Надежда Ивановна

Адрес организации: 620990, Екатеринбург, ГСП, ул. Первомайская, 91, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии твердого тела УрО РАН, www.ihim.uran.ru, E-mail: medvedeva@ihim.uran.ru, Тел. +7 (343) 362-3554.

Подпись Медведевой Н.И. заверяю
Ученый секретарь ФГБУН
Институт химии твердого тела УрО РАН,
Доктор химических наук



Денисова Т.А.

Дата: 15.06.2017