

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Петрова Владислава Павловича
«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

В диссертационной работе В.П. Петрова с помощью техник первопринципных (“ab-initio”) расчетов теоретически изучен ряд соединений с подрешеткой редкоземельных металлов. Работа является актуальной, так как исследуемые вещества находят широкое применение в оптике, а “ab-initio” расчеты, проведенные в работе, позволяют интерпретировать инфракрасные спектры и спектры комбинационного рассеяния, а также устанавливать взаимосвязь между колебаниями решетки и электронной подструктурой.

К достоинствам работы также можно отнести разработанную автором методику оптимизации расчета, что позволило существенно сократить время расчета. Это особенно важно для сложных систем, содержащих большое количество электронов.

С использованием этой методики был проведен расчет ряда титановых пирхлоров и редкоземельных ферроборатов. Определены структура, фононный спектр и упругие параметры. Кроме того, исследовано влияние гидростатического сжатия на эти параметры.

Особо стоит отметить, что приведено сравнение практически всех расчетных данных с экспериментальными.

Впервые проведено моделирование структуры, ИК и КР спектров циклотетрагерманата с помощью различных функционалов. Проведена интерпретация колебательных спектров этого соединения.

Нельзя не отметить большое количество публикаций автора в журналах, индексируемых в международных базах данных, участие в международных конференциях, полученные стипендии и гранты.

В качестве замечаний, можно отметить следующие моменты:

1. Не совсем понятно, почему автор работы во второй главе ограничивается указанной точностью расчетов постоянной решетки, зонной структуры и

- частот фононного спектра, считая, что это соответствует минимальным затратам компьютерных ресурсов и допустимой погрешности расчетов (стр. 9). Насколько критично увеличится потребность в компьютерных ресурсах при увеличении точности расчетов?
2. В третьей главе работы не аргументирован выбор только функционалов V3LYP и PBE0 для исследования титановых пироклоров. В пятой главе автор, например, уже рассматривает и сравнивает результаты, полученные с помощью 7-ми различных функционалов.

Однако, указанные замечания существенно не влияют на качество работы.

Диссертационная работа полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям согласно п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, а также соответствует специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, отрасли науки «физико-математические науки». Считаю, что, Петров Владислав Павлович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Кандидат физико-математических наук,

ассистент кафедры общей физики Физико-технического института ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»

 Чистякова Надежда Владимировна

Дата: 25 мая 2017 г.

Адрес: 634050, г. Томск, проспект Ленина, 30

Телефон: +7 (3822) 70-17-77

E-mail: chistyakovanv@tpu.ru

Подпись Н.В. Чистяковой удостоверяю,

Ученый секретарь ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»

 Ананьева Ольга Афанасьевна

