

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Петрова Владислава Павловича  
на тему: «Структурные и колебательные свойства кристаллов с подрешеткой  
редкоземельных ионов», представленную на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук  
по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Петрова В.П. посвящена комплексному изучению структурных, колебательных и упругих свойств кристаллов с подрешеткой редкоземельных (РЗ) ионов из первых принципов в рамках теории функционала плотности и МО ЛКАО подхода. Несмотря на то, что исследуемые в работе соединения  $R_2Ti_2O_7$  ( $R=Gd - Lu$ ) ранее были изучены экспериментально, а для некоторых из них ранее были проведены *ab initio* расчеты в базисе плоских волн, однозначной картины при описании спектров комбинационного рассеяния (КР) этих соединений не наблюдается. Также отсутствует полная информация о кристаллической структуре, упругих свойствах и фононном спектре для всего ряда  $R=Ce - Lu$  в соединениях со структурой  $RFe_3(BO_3)_4$ , поэтому особо важным представляется найти единый подход для расчета структур и фононных спектров как титанатов ( $R_2Ti_2O_7$ ), так и ферроборатов  $RFe_3(BO_3)_4$ . Крайне актуальными являются результаты, полученные автором, по интерпретации ИК и КР экспериментов, отнесению колебаний и исследованию взаимосвязи между фононной подсистемой и электронной структурой РЗ подрешетки с помощью первопринципных методов.

К наиболее важным результатам, определяющим **научную новизну** диссертационной работы Петрова В.П., относятся следующие результаты:

1) Предложена методика, позволяющая в рамках единого первопринципного подхода описывать структурные, колебательные и упругие

свойства кристаллов с редкоземельной подрешеткой, а именно титанатов  $R_2Ti_2O_7$  ( $R=Gd - Lu$ ) и ферроборатов  $RFe_3(BO_3)_4$  ( $R=Ce - Lu$ ).

2) На основе анализа векторов смещений, полученных из первопринципных расчетов, были классифицированы колебания редкоземельных ферроборатов  $RFe_3(BO_3)_4$  ( $R=Ce - Lu$ ). Показано, что ковалентная связь в группах  $BO_3$ , а также «каркасный» характер цепочек октаэдров  $FeO_6$ , связанных с треугольниками  $BO_3$ , приводят к сильной анизотропии упругих свойств.

3) Автором предложена стехиометрическая модель кристаллической структуры циклотетрагерманата кальция  $Y_2CaGe_4O_{12}$ , позволяющая воспроизводить структурные и спектроскопические данные и определять диапазоны частот, соответствующие колебаниям структурных групп –  $GeO_2$ ,  $GeOGe$ , кольца  $[Ge_4O_{12}]^{8-}$

Необходимо отметить, что первопринципные расчеты выполнены диссертантом на высоком уровне. Автором была проведена большая работа по подбору параметров расчета кулоновских и обменных интегралов в программе CRYSTAL, обеспечивающих хорошее согласие с экспериментальными данными и минимальные затраты компьютерных ресурсов.

Несмотря на высокий уровень работы, к автореферату имеется несколько замечаний:

1) Из текста автореферата не ясно, почему автор выбирает именно циклотетрагерманат  $Y_2CaGe_4O_{12}$  в качестве модельного соединения для разработки его стехиометрической модели.

2) Не определено различие между структурообразующими единицами  $B1O_3$  и  $B2O_3$  в соединении  $RFe_3(BO_3)_4$  ( $R=Ce - Lu$ ).

3) На Рис.1 желательно было нанести точки, соответствующие рассчитанной зависимости объема ячейки титанового пирохлора  $Gd_2Ti_2O_7$  от давления, для наглядного представления соответствия между этой зависимостью и аппроксимацией уравнением состояния Берча-Мурнагана.

4) Следовало указать единицы измерения исследуемых величин на рисунках 2, 3 и в таблицах 1 – 3, 5, 6, а не только в подписях к ним.

5) В автореферате не хватает графического представления зависимостей величин упругих постоянных и частот ИК и КР мод соединения  $Gd_2Ti_2O_7$  от давления.

Вышеперечисленные замечания, однако, не снижают достоинств диссертации. Автор демонстрирует глубокие знания методов и приближений квантовой химии, а также современных экспериментальных техник. В работе используются апробированные подходы и методы расчета, полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными. Основные результаты опубликованы в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК.

Диссертационная работа Петрова В.П. полностью удовлетворяет требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а ее автор, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Кандидат физико-математических наук,

доцент кафедры общей физики

ФГАОУ ВО «Казанский

(Приволжский) федеральный университет»

 Недопекин Олег Владимирович

Дата: 10 мая 2017 г.

ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) ф

420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д.18

Тел.: +7 (843) 233-71-09


Электронный адрес: <http://kpfu.ru>

e-mail: [Oleg.Nedopekin@kpfu.ru](mailto:Oleg.Nedopekin@kpfu.ru)

университет»,



КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
АНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
УПРАВЛЕНИЕ ДОКУМЕНТООБОРОТА И КОНТРОЛЯ

**ПОДПИСЬ**  
*Недопекина О.В.* заверяю  
Документовед  *Тарасова И.Н.*

Подпись к.ф.-м.н., доцента ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет» Недопекина О.В. удостоверяю.