

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.285.02,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
АВТОНОМНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ «УРАЛЬСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
ПЕРВОГО ПРЕЗИДЕНТА РОССИИ Б.Н. ЕЛЬЦИНА», МИНИСТЕРСТВО
НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ,
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 26 апреля 2019 г. № 9

О присуждении Назипову Дмитрию Валерьевичу, гражданство Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Первопринципное исследование структурных, колебательных и упругих свойств низкосимметричных кристаллов с редкоземельной подрешеткой» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния принята к защите 14 февраля 2019 г. (протокол заседания № 3) диссертационным советом Д 212.285.02, созданным на базе ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России, 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19; созданным приказом Минобрнауки России № 105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель, Назипов Дмитрий Валерьевич, 1992 года рождения, в 2014 году окончил ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по специальности 010802 Фундаментальная радиофизика и физическая электроника; в 2018 году окончил очную аспирантуру ФГАОУ ВО «Уральский федеральный

университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия (Физика конденсированного состояния); работает в должности младшего научного сотрудника Отдела оптоэлектроники и полупроводниковой техники НИИ физики и прикладной математики Института естественных наук и математики ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России.

Диссертация выполнена на кафедре физики конденсированного состояния и наноразмерных систем и в отделе оптоэлектроники и полупроводниковой техники НИИ физики и прикладной математики Института естественных наук и математики ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор, **Никифоров Анатолий Елеферьевич** (скончался 22.04.2018 г.), ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Институт естественных наук и математики, кафедра физики конденсированного состояния и наноразмерных систем, профессор.

Официальные оппоненты:

Мостовщикова Елена Викторовна, доктор физико-математических наук, ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, лаборатория магнитных полупроводников, ведущий научный сотрудник;

Юшина Ирина Дмитриевна, кандидат химических наук, ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», г. Челябинск, Научно-образовательный центр «Нанотехнологии», лаборатория многомасштабного моделирования многокомпонентных функциональных материалов, научный сотрудник

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФГБНУ «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук», г. Красноярск – в своем положительном отзыве, подписанном Шабановым Василием Филипповичем, доктором физико-математических наук, профессором, академиком РАН, заведующим отделом оптики, и Втюриным Александром Николаевичем, доктором физико-математических наук, старшим научным сотрудником, главным научным сотрудником института, указала, что диссертационная работа Назипова Д.В. является завершенной научно-квалификационной работой, в которой представлены результаты, имеющие важное научное и практическое значение, вносящие вклад в решение актуальной научной задачи моделирования структурных и колебательных свойств низкосимметричных кристаллов с подрешеткой редкоземельных ионов. Работа соответствует паспорту научной специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния и полностью отвечает требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, а ее автор, Назипов Дмитрий Валерьевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Соискатель имеет 16 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 13 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 4 работы.

Другие публикации представлены в виде 9 тезисов, опубликованных в сборниках материалов всероссийских (2) и международных (7) научных конференций. Общий объем опубликованных работ – 1,187 п.л., авторский вклад – 0,83 п.л.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации:

1. Назипов Д.В. Структура и динамика решетки $\text{Lu}_2\text{Si}_2\text{O}_7$: *ab initio* расчет / **Д.В. Назипов**, А.Е. Никифоров // Физика твердого тела. – 2017. – Т. 59, № 1. – С. 121–125. (0.312 п.л. / 0.2 п.л.)
2. Nazipov D.V. First principle calculation of structure and lattice dynamics of $\text{Lu}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ / **D.V. Nazipov**, А.Е. Nikiforov // EPJ Web of Conf. – 2017. – V. 132. – P. 03036; 0.125 п.л. / 0.08 п.л. (Web of Science, Scopus)
3. Nazipov D.V. Structure and lattice dynamics of Jahn-Teller crystal BiMnO_3 : *ab initio* calculation / **D.V. Nazipov**, А.Е. Nikiforov, L.E. Gonchar // J. Phys. Conf. Series. – 2017. – V. 833. – P. 012006; 0.375 п.л. / 0.25 п.л. (Web of Science, Scopus)
4. Nazipov D.V. Raman spectrum of oxyorthoilicate Lu_2SiO_5 : Ab initio calculation / **D.V. Nazipov**, А.Е. Nikiforov // J. Raman Spec. – 2018. – V. 49. – P. 872–877; 0.375 п.л. / 0.3 п.л. (Web of Science, Scopus)

На автореферат поступили положительные отзывы от:

1. Стрельцова Сергея Владимировича, доктора физико-математических наук, профессора РАН, главного научного сотрудника лаборатории квантовой наноспинтроники ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Содержит вопрос о том на сколько учет корреляционных эффектов меняет фононный спектр BiMnO_3 .
2. Сутина Дмитрия Владимировича, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника лаборатории квантовой химии и спектроскопии им. А.Л. Ивановского ФГБУН Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Содержит вопрос: удовлетворяют ли изучаемые системы

критерию механической стабильности кристаллов, а также не понятно какова погрешность расчетов упругих характеристик.

3. Митрофанова Валентина Яковлевича, доктора физико-математических наук, ведущего научного сотрудника лаборатории статики и кинетики процессов ФГБУН Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Содержит замечание, касающееся отсутствия данных по g-факторам и основному орбитальному состоянию ионов Mn^{3+} , используемых при расчете магнитных моментов ионов Mn^{3+} в соединении $ViMnO_3$.

4. Попова Сергея Эдуардовича, кандидата физико-математических наук, научного сотрудника лаборатории комплексных методов ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Содержит следующие замечания: 1) Автор в работе использует термин «расчеты из первых принципов», который предполагает отсутствие эмпирических и подгоночных параметров, 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, а также не показана достаточность выбранного базиса, не приведены критерии выбора базисного набора 3) В работе не приведены результаты расчетов энергетического расстояния до следующего не заселенного уровня, а также не проведен анализ устойчивости электронной и кристаллической структуры в рамках использованной модели 4) При расчете кристаллов с включением редкоземельных ионов не проведен анализ возможности пренебрежения релятивистскими эффектами 5) При расчетах кристалла $ViMnO_3$ не проведен анализ электронной структуры Mn^{3+} в частности 6) При расчетах интенсивностей спектров КР не проведена оценка влияния на результат

корреляционных эффектов 7) Повсеместно в работе используется термин «Упругие постоянные», хотя было бы более благозвучнее использовать термин «Постоянные упругости» 8) В работе приводятся графики анизотропии модуля Юнга, хотя было бы более практично привести анизотропию скоростей звука, которые легче экспериментально измерять.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их широкой известностью своими достижениями и высокой научной компетентностью в области физики конденсированного состояния, близостью тематики проводимых ими исследований и темы диссертационной работы.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– **впервые получен** спектр комбинационного рассеяния света кристалла пиросиликата лютеция $\text{Lu}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ и **подтверждена** идентификация, предложенная авторами [Ю. Воронько и др. ФТТ 57, 7 (2015)], в последней экспериментальной работе;

– **впервые получен** спектр комбинационного рассеяния света оксиортосиликата лютеция Lu_2SiO_5 и **предложена** новая интерпретация экспериментального спектра;

– **показано**, что минимальной теплопроводностью среди ряда редкоземельных оксиортосиликатов $R_2\text{SiO}_5$ ($R = \text{La-Lu}$) обладают La_2SiO_5 и Pr_2SiO_5 ;

– **показано**, что коэффициент высокотемпературной теплопроводности у оксиортосиликатов со структурой *B*-типа $R_2\text{SiO}_5$ ($R = \text{Ho-Lu}$) незначительно меняется по ряду;

– из первых принципов **показано**, что высокоспиновое состояние ионов Mn^{3+} в кристалле BiMnO_3 является наиболее выгодным;

– **воспроизведено** наличие дипольных моментов на ионах V^{3+} в монокристалле VMnO_3 и **показано** их антисегнетоэлектрическое упорядочение.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что

– **разработан** подход, позволяющий в единой модели описать структурные, колебательные и упругие свойства низкосимметричных кристаллов с редкоземельной подрешеткой;

– **проведена** подробная классификация колебаний Lu_2SiO_5 по типам из анализа спектра комбинационного рассеяния по собственным векторам смещений и методом изотопического замещения.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

– **предсказанные** значения параметров структуры, упругих свойств, а также колебательные спектры для ряда оксиортосиликатов $R_2\text{SiO}_5$ ($R = \text{La-Lu}$) могут использоваться в качестве табличных данных при проведении дальнейших экспериментов;

– **полученные** результаты по коэффициенту теплопроводности для ряда оксиортосиликатов $R_2\text{SiO}_5$ ($R = \text{La-Lu}$) могут мотивировать к проведению новых экспериментальных исследований и помочь в поиске соединений с хорошими характеристиками для использования в качестве термобарьерных покрытий.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

Результаты настоящей работы получены на основе использования хорошо проверенных и многократно апробированных теоретических методов. Достигается комплексное согласие с рядом экспериментальных данных, по параметрам кристаллической решетки, спектрам комбинационного рассеяния, по ширине запрещенной щели, а также по параметрам упругих свойств.

Личный вклад соискателя состоит в проведении всех расчетов в программном пакете, оптимизации процесса вычислений, обработке и анализе полученных результатов, а также в подготовке основных публикаций по выполненной работе и апробации результатов на конференциях.

Диссертация Назипова Д.В. соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней и является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи по исследованию и прогнозированию колебательных и упругих свойств низкосимметричных кристаллов с редкоземельной подрешеткой, имеющей значение для развития физики конденсированного состояния.

На заседании 26 апреля 2019 г. диссертационный совет принял решение присудить Назипову Д.В. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 22 человек, из них 7 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 19 человек, входящих в состав совета, проголосовали за – 18, против – 1, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета

Огородников Игорь Николаевич

Ученый секретарь

диссертационного совета

Ищенко Алексей Владимирович

26 апреля 2019 г.