

**Отзыв на автореферат диссертационной работы Назипова Д.В.
“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 Назипова Д.В. посвящена теоретическому исследованию из первых принципов кристаллической структуры, колебательных спектров и упругих свойств оксидов пиросиликата $\text{Lu}_2\text{Si}_2\text{O}_7$, оксиортосиликатов R_2SiO_5 ($\text{R} = \text{La-Yb}$), а также манганита висмута BiMnO_3 , имеющих низкую симметрию структурного строения. Актуальность темы исследования обусловлена широкой распространенностью силикатных соединений в земной коре и возможностью их практического применения в качестве материалов для сцинтилляторов, лазеров, позитронно-эмиссионной томографии. Низкая теплопроводность оксиортосиликатов также делает их перспективными для использования в качестве термобарьерных покрытий. Манганит висмута является необычным соединением, с центросимметричной структурой, в котором наблюдаются магнитоэлектрические явления. Их природа до конца не изучена и в настоящее время различные свойства этого соединения интенсивно исследуются.

Для исследуемых пиро- и оксиортосиликатов из первых принципов рассчитаны параметры кристаллической структуры, спектры комбинационного рассеяния света (КРС), упругие постоянные. Произведено сопоставление рассчитанных частот с молекулярными группами и атомами, колебаниям которых они предположительно соответствуют. На основе рассчитанных значений упругих модулей получены средние значения скорости звука, температуры Дебая и сделана оценка коэффициентов минимальной теплопроводности для соединений R_2SiO_5 ($\text{R} = \text{La-Yb}$). Результаты расчетов показали хорошее согласие с существующими экспериментальными данными.

Для манганита висмута проведены расчеты кристаллической структуры, спектров КРС, инфракрасного поглощения. Также рассчитаны магнитные моменты марганца и выявлено наличие дипольных моментов на подрешетке висмута. Результаты расчетов сопоставлены с экспериментальными данными.

Следует отметить некоторые недостатки работы.

- На рис. 7 автореферата приведены зависимости рассчитанного коэффициента теплопроводности в зависимости от типа R – элемента. Видно, что при переходе от соединений со структурой A-типа ($\text{R}=\text{Gd}$) к соединениям со структурой B-типа ($\text{R}=\text{Dy}$) происходит заметное изменение его величины от 0.861 до 0.801 $\text{Bt}/\text{m}\cdot\text{K}$, которая для Dy_2SiO_5 становится близкой к La_2SiO_5 . Представляется целесообразным проанализировать причины такого поведения, практически не обсуждаемого в работе.

2. В некоторых местах автореферата при описании сегнетоэлектрических явлений упоминается термин “ферроэлектрический” (например, на с. 19), в других местах – “сегнетоэлектрический”. Целесообразно использовать единую терминологию по всему тексту.
3. В автореферате присутствует ряд опечаток, которые в некоторых местах затрудняют понимание текста.

Упомянутые недостатки не снижают общей положительной оценки работы.

Результаты диссертации изложены в 13 публикациях, из которых 4 статьи в изданиях, индексируемых в международных базах, остальные – тезисы конференций. Полученные результаты являются новыми и достоверными, автор внес определяющий вклад в работу.

В целом, диссертационная работа представляет собой законченное научное исследование, результаты которого имеют как большую научную значимость для соответствующей отрасли знаний, так и практический интерес. Работа соответствует требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней и удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 01.04.07 - “Физика конденсированного состояния”, физико-математические науки. Автор диссертации заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Козленко Денис Петрович,
Доктор физико-математических наук,
Начальник Научно-экспериментального отдела
нейтронных исследований конденсированных сред,
Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка,
Объединенный институт ядерных исследований
141980 г. Дубна Московской обл.,
ул. Жолио-Кюри, 6
E-mail: denk@nf.jinr.ru
Тел. +7-496-2163783

Д.П. Козленко

10.02.2020

Подпись Д.П. Козленко заверяю

Ученый секретарь ЛНФ ОИЯИ

Д.М. Худоба

Д.М. Худоба

