

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Назипова Дмитрия Валерьевича «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.

В диссертационной работе Назипова Д.В. проведено теоретическое исследование кристаллического строения, колебательных спектров и упругих свойств низкосимметричных силикатов и мanganитов, в том числе, $\text{Lu}_2\text{Si}_2\text{O}_7$, $R_2\text{SiO}_5$ (R – редкоземельный ион) и BiMnO_3 . Изученные в рамках диссертационного исследования кристаллы представляют собой оптические матрицы, которые находят свое применение, в частности, в качестве лазерных сред, детекторов ионизирующего излучения и термобарьерных покрытий. Проведенные соискателем расчеты в программном пакете CRYSTAL основаны на теории функционала плотности и методе Хартри-Фока.

В ходе работы рассчитаны колебательные спектры и параметры упругих свойств ряда силикатов $\text{Lu}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ и $R_2\text{SiO}_5$ ($R = \text{La–Lu}$). Существенная часть представленной диссертации посвящена анализу результатов впервые проведенного расчета спектров комбинационного рассеяния оксиортосиликатов $R_2\text{SiO}_5$ ($R = \text{La–Lu}$), и на их основе предложена интерпретация регистрируемых колебательных спектров. Также впервые с использованием первопринципного подхода рассчитаны постоянные упругости и предсказаны параметры упругих свойств. По итогам квантово-химических расчетов определен коэффициент теплопроводности. В работе показано, что минимальной теплопроводностью среди оксиортосиликатов характеризуются соединения, содержащие лантан и празеодим. Исследован монокристалл BiMnO_3 низкосимметричной полиморфной модификации. Впервые рассчитаны фононные спектры данного мanganита, воспроизведено наличие дипольного момента в подрешетке ионов висмута и получена величина магнитного момента.

Диссертационная работа Д.В. Назипова представляет собой законченное исследование на актуальную тему, выполненное на высоком научном уровне. В диссертации содержится решение задач, имеющих важное практическое значение. Работа вносит существенный вклад в развитие физики конденсированного состояния, а также способствует решению прикладных задач аналитической спектроскопии, геохимии и физической химии, в частности. Основные результаты опубликованы в реферируемых российских и зарубежных журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ, доложены на российских и международных конференциях. Считаю, что

по актуальности, новизне, научной и практической значимости результатов диссертационная работа Назипова Дмитрия Валерьевича «Первопринципное исследование структурных, колебательных и упругих свойств низкосимметричных кристаллов с редкоземельной подрешеткой» соответствует требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а Назипов Дмитрий Валерьевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности физика конденсированного состояния (01.04.07).

старший научный сотрудник
лаборатории структурного и фазового анализа
Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук
кандидат химических наук

И.И. Леонидов

«25» 02 2020 года
Леонидов Иван Ильич
кандидат химических наук (02.00.21)
старший научный сотрудник
ФГБУН Институт химии твердого тела Уральского отделения РАН
620990, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, д. 91
тел.: +7 (343) 362-32-06
e-mail: ivanleonidov@ihim.uran.ru

Подпись Леонидова И.И. удостоверяю
ученый секретарь ИХТТ УрО РАН
доктор химических наук

Т.А. Денисова

