



*LU aģentūra -
Latvijas Universitātes
CIETVIELU FIZIKAS INSTITŪTS*

*INSTITUTE OF SOLID STATE PHYSICS
University of Latvia*

Nr. 90002124925
Kengaraga iela 8, LV-1063 Rīga, Latvija; Tel. (371) 67187480

В диссертационный совет Д 24.2.306.01 при
Иркутском государственном университете

ОТЗЫВ

**на автореферат диссертации Чуклиной Надежды Геннадьевны
«Исследование механизмов миграции автолокализованной дырки в
кристаллах щелочно-земельных фторидов методом молекулярной
динамики», представленной на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук по специальности 1.3.8 –Физика
конденсированного состояния.**

Диссертационная работа Чуклиной Н.Г. представляет собой актуальное теоретическое исследование, направленное на изучение механизмов миграции автолокализованных электронных возбуждений во фторидных кристаллах с помощью квантовохимических методов. А в частности, исследование возможных конфигураций автолокализованной дырки во фторидных кристаллах (CaF_2 , SrF_2 , BaF_2 и LaF_3), получение сведений об особенностях процесса диффузии V_k -центра в кристалла с различной кристаллической структурой, исследование зависимости значения энергии активации диффузии от значения постоянной решетки. Теоретическое исследование процессов миграции во фторидных кристаллах позволяет получить ответы на вопросы, возникающие при анализе экспериментальных данных, а также улучшить понимание процессов переноса энергии по кристаллу.

К наиболее важным результатам диссертационной работы следует отнести предсказанную возможность существования промежуточного состояния в кристаллах SrF_2 и BaF_2 , которое даёт дополнительный канал диффузии автолокализованной дырки по кристаллу. В работе также показана возможность существования четырёх конфигураций V_k -центра в кристалле LaF_3 . Предложенные конфигурации находятся в согласии с экспериментальными данными. Также были предложены четыре возможных механизма миграции автолокализованной дырки в кристалле LaF_3 . При этом установлено, что близкое по геометрии расположение конфигураций V_k -центра не всегда приводит к прямой диффузии дефекта из одной конфигурации в

другую (например 1-4), а в большинстве случаев идёт через 2-ую конфигурацию. Для всех возможных механизмов миграции были представлены значения энергии барьера, часть которых находит своё подтверждение в согласии с экспериментальными значениями.

В целом, диссертационная работа Чуклиной Н.Г. актуальна по своей тематике, а проведенные в ней исследования проведены на высоком уровне. Достоверность результатов не представляет сомнения, выводы обоснованы. Работа хорошо апробирована, результаты изложены в статьях, опубликованных в международных журналах.

Таким образом, диссертационная работа «Исследование механизмов миграции автолокализованной дырки в кристаллах щелочно-земельных фторидов методом молекулярной динамики» представляет законченное научное исследование, содержит новые теоретические результаты, а её автор Чуклина Н.Г., заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Ведущий научный сотрудник
Института физики твёрдого тела при университете Латвии
Заведующий лабораторией “Кинетики самоорганизующихся систем”
Доктор физико-математических наук (01.04.17 - химическая физика)
Кузовков Владимир Николаевич
Kengaraga iela 8, LV-1063 Rīga, Latvija
Tel. +371 27134915
E-mail: kuzovkov@latnet.lv

