

Отзыв

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

Диссертация Чуклиной Н.Г. посвящена теоретическому исследованию конфигураций автолокализованной дырки и механизмов её диффузии во фторидных кристаллах с различной структурой. Тема диссертации представляется весьма актуальной, поскольку она касается применения современных методов квантовой химии для понимания механизма миграции электронного возбуждения по кристаллу. Эта задача, касающаяся прикладных и фундаментальных аспектов применения различных кристаллов в качестве сцинтилляторов, интересна, как, например, в области ядерной физики, так и в иных областях науки.

Автором исследована группа кристаллов CaF_2 , SrF_2 , BaF_2 и LaF_3 и изучен механизм диффузии автолокализованной дырки при линейно увеличивающемся значении температуры. Тщательный выбор методов и калибровка параметров расчёта, а также хорошее согласие экспериментальных данных с результатами расчетов на модельных структурах позволяют говорить о высокой надежности полученных результатов.

В диссертации получено большое количество интересных в научном плане расчетных результатов; среди них можно выделить, например, следующие. Доказана возможность существования в кристаллах BaF_2 и SrF_2 дополнительного канала миграции автолокализованной дырки по кристаллу через промежуточное состояние. Показана возможность существования четырёх конфигураций V_k -центра в кристалле LaF_3 со структурой тисонита. Показано, что существует четыре возможных канала диффузии V_k -центра в кристалле LaF_3 .

В целом, результаты исследования существенно расширяют понимание фотохимических процессов, протекающих во фторидных кристаллах. Замечаний по существу у меня нет. Результаты исследования опубликованы в известных журналах и широко представлены на конференциях.

Исходя из автореферата диссертации, можно заключить, что по объему, научному уровню, научной новизне, практической значимости, количеству и качеству научных публикаций диссертационная работа соответствует требованиям, пп. 9-14 Положения ВАК о присуждении учёных степеней (утверждённым постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842, в редакции от 01 октября 2018 г.), предъявляемым к диссертационным работам, а ее автор – Чуклина Надежда Геннадьевна, заслуживает учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Зав. лаб. КПОЭМК, ведущий научный сотрудник федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Иркутский национальный исследовательский технический университет» (ФГБОУ ВО ИРНИТУ), кандидат химических наук (02.00.04 – физическая химия)

Петрушенко Игорь Константинович

664074, Российская Федерация, г. Иркутск, ул. Лермонтова 83.
Тел. + 7 (3952) 405-100
E-mail: igor.petrushenko@istu.edu
г. Иркутск, 08.12.2021 г.



Петрушенко И. К.
ИЗВЕЩЕНИЕ
Иркутский филиал ФГБОУ ВО «ИРНИТУ»
А.И.