

ОТЗЫВ

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

Целью диссертационной работы является исследование конфигураций автолокализованной дырки и механизмов её диффузии во фторидных кристаллах (CaF_2 , SrF_2 , BaF_2 и LaF_3) методом молекулярной динамики из первых принципов. Исследуемые кристаллы широко используются в качестве материалов для активных сред в лазерах, люминофоров и сцинтилляторов. Поэтому исследование процессов переноса энергии по кристаллу во фторидных кристаллах продолжает оставаться актуальным.

В обсуждаемой диссертации была впервые использована теория функционала плотности в приближении DFT+U с подобранными автором параметрами ($U=11$ и $J=3$) для $2p$ -орбиталей иона фтора в рамках метода молекулярной динамики, что позволило качественно верно описать явление автолокализации дырки (АЛД) и смоделировать непосредственно процесс миграции V_k -центра. Также интересными представляются: обнаружение промежуточного состояния V_k -центра и его влияние на пути миграции АЛД в кристаллах со структурой флюорита; исследование возможных конфигураций автолокализованной дырки и возможности реализации перехода между ними в рамках процесса переноса энергии по кристаллу с учётом особенностей структуры тиссонита. В частности, было определено значение энергии активации для перехода в промежуточное состояние и связанного с ним механизма миграции. Была установлена зависимость значения энергии активации от значения постоянной решётки в рамках ряда кристаллов (CaF_2 , SrF_2 и BaF_2). Также были определены значения энергии барьера для всех возможных каналов диффузии V_k -центра в кристалле LaF_3 и сравнены и экспериментальными значениями. Были рассмотрены особенности механизма миграции АЛД, а также приведено обоснование такого поведения.

Прочтение автореферата оставляет положительное впечатление о работе соискателя. Все изложенные в автореферате разделы систематизированы, ясно и логично изложены, хорошо иллюстрированы. Анализ представленных в автореферате материалов свидетельствует о перспективности дальнейшего развития работы и необходимости продолжения исследований. Существенных недостатков в оформлении и содержании автореферата не обнаружено. По материалам, изложенным в автореферате, можно сделать вывод, что диссертация является законченной научно-квалификационной работой. Количество и качество публикаций, уровень апробации соответствуют требованиям ВАК. Достоверность результатов и обоснованность выводов не представляет сомнения.

Кандидатская диссертация «Исследование механизмов миграции автолокализованной дырки в кристаллах щелочно-земельных фторидов методом молекулярной динамики» представляет законченное научное исследование, выполненное на должном научном уровне, а её автор Чуклина Надежда Геннадьевна заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Томилин Феликс Николаевич

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук». Старший научный сотрудник Лаборатории физики магнитных явлений, канд. хим. наук. Почтовый адрес: Россия, 660036 г. Красноярск, ул. Академгородок, 50, строение 38. Телефон: +(391)243-26-35. Факс +(391)243-89-23. E-mail: felixnt@gmail.com. Шифр специальности: 02.00.04 – физическая химия.

29 ноября 2021 г.

Согласен на включение в аттестационное дело и дальнейшую обработку моих персональных данных.

