

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Попова Николая Валерьевича
"Расчет электронной структуры редкоземельных ионов во фторидных
кристаллах с учетом релятивистских эффектов", представленной на соискание
ученой степени кандидата физико-математических наук по
специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Попова Н. В. посвящена квантовохимическим расчетам электронной структуры редкоземельных дефектов во фторидных кристаллах с учетом релятивистских эффектов. Рассматриваемые материалы применяются как сцинтилляторы, люминофоры и части оптоэлектронных устройств. Теоретическое изучение электронной структуры подобных центров позволяет получить ответы на вопросы, возникающие при анализе экспериментальных данных, а также улучшить понимание таких явлений как спин-орбитальное взаимодействие в кристаллах.

В диссертационной работе автором развита схема квантово-химического расчета с использованием формализма встроенного кластера. Данный метод позволяет успешно рассчитывать электронную структуру редкоземельных центров в кристаллах с учетом их окружения. Однако, полное описание расщепления энергетических уровней и последующее сравнение их с экспериментальными данными невозможно без учета скаляр-релятивистских поправок и спин-орбитального взаимодействия. Предложенные автором методы учета таких эффектов в сочетании с формализмом встроенного кластера позволяют адекватно описывать энергетические уровни редкоземельных дефектов в кристаллах.

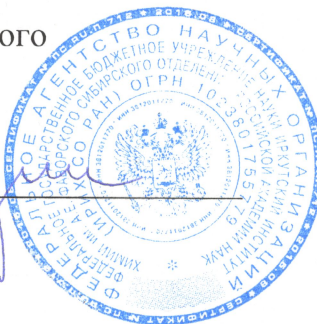
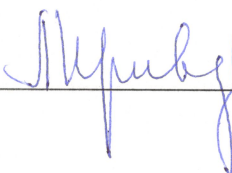
К наиболее важным результатам работы следует отнести предсказанную возможность существования центров Ce^{2+} в кристаллах CaF_2 и SrF_2 . Рассчитанные спектры поглощения этих центров находятся в согласии с экспериментальными данными. При этом установлено, что основное состояние центра Ce^{2+} в кристалле CaF_2 носит смешанный $4f^15d^1$ синглет-триплетный характер. В работе также была показана возможность существования центров Sm^{2+} с симметрией C_{2v} в кристалле LaF_3 , где в качестве зарядового компенсатора выступает анионная вакансия в подрешетке F_2 . Это также подтверждается согласием рассчитанного и экспериментального спектров поглощения.

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

Таким образом, диссертационная работа "Расчет электронной структуры редкоземельных ионов во фторидных кристаллах с учетом релятивистских эффектов" соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, а ее автор Попов Николай Валерьевич заслуживает присуждения искомой степени.

Доктор химических наук (02.00.03), профессор,
заведующий Лабораторией ядерного магнитного
резонанса Федерального государственного
бюджетного учреждения науки Иркутского
института химии им. А.Е. Фаворского Сибирского
отделения Российской академии наук

Кривдин Леонид Борисович



Россия, 664033, г. Иркутск, ул. Фаворского, 1

Телефон: (3952) 51-14-31

e-mail: krivdin_office@irioch.irk.ru

Согласен на обработку персональных данных

2 октября 2017 г.

