

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Попова Н.В.

«Расчёт электронной структуры редкоземельных ионов во фторидных кристаллах с учётом релятивистских эффектов», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа Попова Н. В. посвящена моделированию электронной структуры редкоземельных дефектов во фторидных кристаллах с учётом скаляр-релятивистских и спин-орбитальных эффектов с помощью методов квантовой химии.

Фторидные кристаллы, активированные редкоземельными примесями, активно применяются в разработке новых материалов для лазеров, люминофоров, сцинтилляторов. Квантово-химическое моделирование таких центров с одной стороны позволяет интерпретировать полученные экспериментальные структурные и спектроскопические данные, а с другой – теоретически предсказывать новые материалы с заданными свойствами.

Среди основных результатов, полученных диссертантом, можно выделить следующие:

1. Представлена схема квантово-химического расчёта с учётом скаляр-релятивистских поправок и спин-орбитального взаимодействия в формализме встроеного кластера, которая позволяет адекватно описывать электронную структуру редкоземельных центров во фторидных кристаллах.
2. Показана возможность существования центров Ce^{2+} в кристаллах SrF_2 , электронная структура таких центров схожа с электронной структурой аналогичных центров в кристаллах CaF_2 .
3. Показано, что центры Sm^{2+} могут образовываться в кристаллах LaF_3 с участием зарядового компенсатора – ближайшей к редкоземельному центру вакансии в анионной подрешётке F_2 .

Среди замечаний следует отметить:

1. В диссертации и автореферате присутствует ряд опечаток, стилистических ошибок и сложносоставных предложений, затрудняющих понимание отдельных участков текста.
2. На странице 16 автореферата описание уровней энергии центра Sm^{2+} (5D_0 , 5D_1 , 5D_2 , 5D_3) отличается от значений, представленных на Рисунке 7. Аналогичное расхождение присутствует и в тексте диссертации.

Однако, эти замечания не снижают ценности результатов, полученных автором.

Научная новизна и практическая значимость полученных автором результатов не вызывают сомнений. Результаты исследования достаточно отражены в публикациях автора в научных журналах (IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, Radiation Measurements) и прошли апробацию на конференциях различного уровня (EURODIM 2014, LUMDETR 2015, ЛЛФ 2016). При оформлении автореферата учтены все требования ВАК. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертационной работы.

Считаю, что диссертационная работа «Расчёт электронной структуры редкоземельных ионов во фторидных кристаллах с учётом релятивистских эффектов» отвечает требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор Попов Н.В.

