

Отзыв руководителя

на диссертационную работу Н.В. Попова «Расчёт электронной структуры редкоземельных ионов во фторидных кристаллах с учётом релятивистских эффектов», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 физика конденсированного состояния.

Диссертация Н.В. Попова посвящена исследованию неэмпирическим расчетам точечных дефектов (Ce^{3+} , Ce^{2+} , Sm^{2+} -вакансия) в кристаллах фторидов CaF_2 , SrF_2 , LaF_3 . Новизной работы является проведение расчетов с учетом релятивистских эффектов, что позволило количественно рассчитать спин-орбитальную структуру электронных состояний. Неэмпирические расчеты такого рода являются весьма трудоемкими, но в связи с развитием компьютерной техники активно развиваются в последнее время. Материалы, исследованные в диссертации, перспективны или используются в качестве люминофоров и сцинтилляторов, поэтому теоретическое изучение их электронной структуры и оптических свойств представляет как научный, так и практический интерес.

За время обучения в аспирантуре ИГХ СО РАН по направлению 01.04.07 (физика конденсированного состояния) в 2012-2016 годах Николай Попов освоил методику проведения неэмпирических расчетов электронных спектров, как точечных дефектов, так и периодических структур (кристаллов). Последовательно усложняя расчетные исследования он переходил от Ce^{3+} в фториде кальция, обнаружив тонкий эффект — незначительное смещение иона Ce^{3+} из катионного узла, к расчетам спектров Ce^{2+} в CaF_2 , SrF_2 , в которых основное состояние иона описывается конфигурацией $4f^15d^1$ (а не $4f^2$ как можно было бы ожидать). И наконец, им произведен расчет центра Sm^{2+} -вакансия в непростой структуре фторида лантана, что позволило установить пространственную структуру центра и объяснить детали оптических спектров. Все расчетные спектры тщательно сравнивались с экспериментальными и, в большинстве своем, показывали хорошее согласие с ними.

Николай Попов показал явную склонность к самостоятельной работе, проявил способности к изучению и пониманию нового материала как в области квантово-химических расчетов, так и в спектроскопической классификации электронных состояний центров. Все опубликованные работы практически полностью задуманы и написаны им самим. Н. В. Попов лично участвовал в работе двух российских (ЛЛФ 2014, 2016) и международной конференции (LUMDETR2015) с устными и стендовыми докладами, устный доклад на конференции EURODIM 2014 был зачитан соавтором по причине задержки с визой.

Считаю, что по совокупности выполненных на хорошем научном уровне расчетных исследований Попов Николай Валерьевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния».

Раджабов Евгений Александрович, Доктор физико-математических наук, *С.Н.С.*

01.04.07 – физика конденсированного состояния,

Зав. лабораторией физики монокристаллов

ФГБУН Института геохимии им. А.П.Виноградова СО РАН

адрес: Иркутск 664033, ул. Фаворского 1а

e-mail: eradzh@igc.irk.ru, телефон 8(3952)51 14 62

22 июня 2017 года

Подпись *Раджабов*
ЗАВЕРЯЮ
Зав. канцелярией
ИГХ СО РАН

