

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по организации научной и
проектно-инновационной деятельности
Южного федерального университета



д.э.н., доцент
И.К. Шевченко

«17» марта 2016 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации

федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южный федеральный университет» о диссертации Скачедуба Александра Валерьевича «Спектроскопические и структурные параметры оптических кристаллов вольфраматов и молибдатов щёлочноземельных металлов, активированных ионами неодима и эрбия», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика

Актуальность избранной темы диссертационного исследования.

В связи с тем, что в настоящее время одной из проблем современной фотоники является поиск новых нелинейных оптических конденсированных сред для расширения диапазона генерации лазерного электромагнитного излучения. Наиболее эффективным способом поиска, с точки зрения финансовых и временных затрат, является проведение комплексных исследований взаимосвязи состав-структура-свойство. Изучение закономерностей влияния химического состава и структурных параметров на оптические и другие свойства кристаллов позволяет найти новые высокоэффективные активные среды или повысить КДП уже существующих. Поэтому, диссертантом выбран данный кристаллохимический подход, который основан на выявлении связи в последовательности состав-структура-свойство, что позволяет сократить путь от соединения к материалу, годного для изготовления активных и перестраиваемых оптических лазерных сред.

Цели и задачи исследований.

Основной целью диссертационной работы является установление закономерностей оптических, спектральных свойств и структурных параметров в номинально чистых и активированных редкоземельными ионами (Nd^{3+} , Er^{3+}) монокристаллах вольфраматов и молибдатов щёлочноземельных металлов. Выполнение поставленной цели потребовало от автора изучить большой объем литературных данных за последние 50 лет, посвященных теории оптического излучения атомов, находящихся в кристаллическом поле. Так же для выполнения теоретических расчётов автор разработал математические алгоритмы, необходимые для расчётов спектроскопических и кинетических параметров исследуемых кристаллов. С использованием программного комплекса ТОПОС и имеющихся данных рентгеноструктурного анализа по кристаллам со структурой шеелита, которых немало накопилось за 80 лет, рассчитаны стереоатомные параметры всех атомов в кристаллической структуре шеелитов и выявлены некоторые закономерности их изменения в зависимости от состава.

Новизна и практическая ценность диссертационного исследования.

Из научной новизны и практической ценности диссертационной работы Скачедуб А.В. можно выделить следующие положения:

1. Впервые, с учётом отражений на гранях образцов, рассчитаны спектроскопические параметры оптических монокристаллов $\text{SrWO}_4: \text{Nd}^{3+}$ со структурой шеелита, в которых использовался тантал (Ta) в качестве соактиваторной примеси, компенсирующей избыточный электрический заряд Nd^{3+} . С учётом всех особенностей, полученные спектроскопические результаты являются новыми научными данными. Показано, что тантал может быть использован в качестве компенсатора избыточного электрического заряда в монокристаллах, активированных редкоземельными ионами.

2. Выявлено нарушение регулярной структуры кристаллической решётки в кристаллах $\text{SrW}(\text{Mo})\text{O}_4$ и PbWO_4 , активированных ионами Nd^{3+} и Er^{3+} соответственно, связанное с существованием оптических центров,

имеющих симметрию окружения ниже S_4 , количество которых находится в прямой зависимости от концентрации активатора. Исходя из результатов спектроскопических исследований видно, что замещающие ионы-активаторы при превышении концентрации в 1% от атомов двухвалентного металла, нарушают регулярную структуру монокристаллов со структурой шеелита, о чём свидетельствует рост значений параметров интенсивности Джадда-Офельта.

3. Впервые в диапазоне 840-1420 нм измерены спектры люминесценции монокристаллов $\text{SrWO}_4: \text{Nd}^{3+}$, в которых в качестве соактиваторной примеси, компенсирующей избыточный электрический заряд примесных ионов неодима (Nd^{3+}), использовались ионы тантала (Ta^{5+}). Исходя из спектрально-кинетических данных, приведённых в работе видно, что соактивация ионами тантала исследуемых кристаллов приводит к незначительному увеличению радиационного времени жизни уровня ${}^4\text{F}_{3/2}$ ионов неодима – до 234×10^{-6} с. Полученный результат может иметь практическую ценность при решении конкретной спектроскопической задачи.

4. Впервые рассчитаны параметры полиэдров Вороного-Дирихле атомов кальция в монокристаллах CaWO_4 и CaMoO_4 и объёмы пересечений внешних электронных оболочек атомов связи Ca–O в зависимости от внешнего давления, оказываемого на кристалл. Хотя координаты атомов и параметры элементарной ячейки монокристаллов вольфраматов и молибдатов кальция, находящихся как при нормальных условиях, так и под давлением, исследовались неоднократно, подобные исследования проведены впервые. Сочетание метода пересекающихся сфер и метода полиэдров Вороного-Дирихле позволяет описывать каждое химическое взаимодействие между атомами, помимо межъядерного расстояния, тремя дополнительными параметрами: значением площади грани полиэдров Вороного-Дирихле соседних атомов, величиной телесного угла, под которым видна эта общая грань полиэдров Вороного-Дирихле из положения ядра любого из этих атомов, объемом бипирамиды, в вершинах которой находятся атомы, а в

плоскости основания – грань полиэдров Вороного-Дирихле, общая для этих атомов. Данный метод описания структуры и межатомного взаимодействия, несомненно, найдёт своё применение в будущем.

Обоснованность и достоверность полученных результатов.

Все теоретические выводы и предположения автора достаточно хорошо аргументированы с научной точки зрения и носят достоверный характер. Большой практический интерес представляют данные зависимости спектроскопических параметров исследуемых в работе монокристаллов со структурой шеелита от состава. Достоверность полученных результатов в работе обеспечена использованием современных теоретических методов исследования, корректным применением и глубоким пониманием имеющихся данных, использованием современного оборудования и согласованностью полученных результатов с данными, представленными в литературных источниках.

Текст диссертации написан грамотно как с грамматической точки зрения, так и с научной. Автор владеет техническим языком и специальными знаниями, достаточными для профессионального изложения сути и особенностей рассматриваемых в работе задач.

Представленная работа является теоретическим и экспериментальным исследованием, проведенным в соавторстве, что отражено в публикациях. Все научные результаты диссертационной работы полностью апробированы и опубликованы в научных журналах и материалах научно-практических конференций.

Критические замечания.

При общей высокой оценке диссертационной работы Скачедуба А.В. по содержанию и представлению результатов можно сделать следующие замечания:

1. В работе приводятся значения параметров интенсивности Джадда-Офельта электронных переходов в редкоземельных ионах, но не приведены соответствующие погрешности. Так же не рассчитаны погрешности важного спектроскопического параметра – пикового сечения

испускания. Значение данного параметра, в совокупности с параметрами интенсивности, являются определяющим при поиске активных сред для стимулированного излучения.

2. Для расчётов кинетических параметров монокристалла $\text{SrMoO}_4:\text{Nd}^{3+}$ используется не оригинальная кинетика люминесценции, а приведённая в литературных источниках. Данный факт, несомненно, мог отразиться на значениях кинетических параметров, вычисленных в диссертационной работе.

Высказанные критические замечания не ставят под сомнение правильность полученных результатов, их значимость, новизну выполненного диссертационного исследования.

Заключение.

Диссертация Скачедуба Александра Валерьевича на тему: «Спектроскопические и структурные параметры оптических кристаллов вольфраматов и молибдатов щёлочноземельных металлов, активированных ионами неодима и эрбия» является законченной научно-практической работой, в которой содержатся решения задач, имеющих существенное значение для развития рассматриваемой отрасли знаний (физико-математические науки, оптика). Работа выполнена на высоком профессиональном уровне, обладает научной новизной и практической значимостью. Диссертант проявил себя, как сложившийся специалист высокого класса в области оптических лазерных сред.

На основании вышеизложенного следует считать:

– Диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842;

– Тема и содержание диссертации соответствуют паспорту специальности 01.04.05 – оптика;

– Материалы диссертации в полном объеме изложены в работах, опубликованных соискателем ученой степени;

– Публикации соискателя соответствуют требованиям, предусмотренным пунктами 11, 13 и 14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842.

Соискатель Скачедуб Александр Валерьевич заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Отзыв подготовлен Резниченко Ларисой Андреевной, д.ф.-м.н.(01.04.07 – физика конденсированного состояния), профессором, зав. отделом интеллектуальных материалов и нанотехнологий НИИ физики Южного федерального университета (344090, г. Ростов-на-Дону, просп. Стачки 194, ilich001@yandex.ru, 8-918-535-14-83(моб.), 8-863-243-40-66(служ.).

Отзыв рассмотрен и утверждён на заседании отдела интеллектуальных материалов и нанотехнологий НИИ физики ЮФУ, протокол №17 от «11» марта 2016 г.

Зав. отделом интеллектуальных материалов
и нанотехнологий Научно-исследовательского института физики
Южного федерального университета,
доктор физико-математических наук, профессор

Лариса Андреевна Резниченко



ЗАВЕРЯЮ:

Ведущий специалист по работе с персоналом

«16» 03 2016 г.