Отзыв на автореферат диссертационной работы Антипина А.М. “Строение монокристаллов редкоземельных молибдатов $Ln_5Mo_3O_{16+\delta}$ (Ln = Pr, Nd), Ln_2MoO_6 (Ln = La, Pr, Nd) и легированных соединений на их основе”, представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.18 - “Кристаллография, физика кристаллов”

Диссертационная работа Антипина А.М. посвящена изучению особенностей строения монокристаллов $Ln_5Mo_3O_{16+\delta}$ (Ln = Pr, Nd), Ln_2MoO_6 (Ln = La, Pr, Nd), и соединений на их основе, легированных атомами V, Ca, Pb, W, Mg, и установлению закономерностей между химическим составом и атомной структурой. Актуальность темы исследования обусловлена тем, что многие материалы класса молибдатов обладают сегнетоэлектрическими, люминесцентными, электрофизическими свойствами, перспективными для применения в высокотехнологичных отраслях. Важной задачей является поиск новых материалов, которые могут обладать особыми свойствами или улучшенными характеристиками по сравнению с уже известными.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав и заключения. Среди наиболее важных результатов работы стоит отметить следующие.
Установлены особенности атомной структуры групп соединений $Ln_5Mo_3O_{16+\delta}$ (Ln = Pr, Nd), Ln_2MoO_6 (Ln = La, Pr, Nd), и соединений на их основе, легированных атомами V, Ca, Pb, W, Mg. В структурах монокристаллов $Pr_5Mo_3O_{16+\delta}$ и $Nd_5Mo_3O_{16+\delta}$ обнаружено частичное взаимное замещение катионов в позициях Nd(Pr) и Mo, расщепление позиций атомов кислорода и присутствие избыточного кислорода в октаэдрических полостях. При легировании Ca и Pb в монокристаллах $Nd_5Mo_3O_{16+\delta}$ эти атомы частично замещают атомы Nd, а легирование V и W приводит к частичному замещению этими атомами атомов Mo. Для монокристаллов Nd_2MoO_6 наблюдается моноклинная фаза пр. гр. I2/c в области низких температур и при комнатной температуре, а также метастабильная высокотемпературная тетрагональная фаза пр. гр. $I4_1/acd$. Для монокристаллов La_2MoO_6 и Pr_2MoO_6 при высокой температуре также наблюдается тетрагональная фаза центросимметричной пр. гр. $I4_1/acd$, а при комнатной температуре возникает тетрагональная фаза нецентросимметричной пр. гр. I-4c2. Понижение симметрии связано со смещением кислородных позиций. При легировании соединений Ln_2MoO_6 атомы Mg частично замещают атомы Mo, также происходит расщепление основных редкоземельных и кислородных позиций.

Следует отметить некоторые недостатки работы.

1. В исследуемых соединениях есть кислородная нестехиометрия δ. Оценивалась ли ее величина какими-либо методами? Было бы полезно привести в автореферате оценочные значения для типовых соединений.
2. В автореферате весьма подробно графически проиллюстрированы структуры различных фаз исследуемых соединений и эффекты катионных замещений. В тоже время было бы весьма полезно привести таблицы с набором основных структурных параметров, включая параметры элементарной ячейки и атомные координаты.
3. В описании результатов исследования оксимолибдатов (с. 19 автореферата) сказано, что атомы кислорода в структурах La_2MoO_6 и Pr_2MoO_6 смещаются из своих положений и не могут быть корректно учтены в рамках пр. гр. I-4c2.

Можно ли предложить другие модели атомной структуры данных соединений, учитывающие эти смещения, или указанные смещения имеют некогерентный характер, обусловленный присутствием нестехиометрии?

Упомянутые недостатки не снижают общей положительной оценки работы.

Результаты диссертации изложены в 13 публикациях, индексируемых в международных системах цитирования и представлены в виде докладов на многочисленных международных и российских научных конференциях. Полученные результаты являются новыми и достоверными, автор внес определяющий вклад в работу.

В целом, диссертационная работа представляет собой законченное научное исследование, результаты которого имеют как большую научную значимость для соответствующей отрасли знаний, так и практический интерес. Работа соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 01.04.18 - “Кристаллография, физика кристаллов”, физико-математические науки. Автор диссертации заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Козленко Денис Петрович,
Доктор физико-математических наук,
Начальник Научно-экспериментального отдела
нейтронных исследований конденсированных сред,
Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка,
Объединенный институт ядерных исследований
141980 г. Дубна Московской обл.,
ул. Жолио-Кюри, 6
E-mail: denk@nf.jinr.ru
Тел. +7-496-2163783

Подпись Д.П. Козленко заверяю

Ученый секретарь ЛНФ ОИЯИ

Д.М. Худоба

11/01/2022