

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.080.03,
созданного на базе Федерального государственного бюджетного учреждения
науки Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии
наук (ФГБУН ИПСМ РАН), по диссертации на соискание ученой степени
кандидата наук

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от «5» марта 2020 г., протокол
№ 3/20

О присуждении Щербину Степану Александровичу, гражданину РФ,
учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Делокализованные ангармонические колебания в системах
с дискретной симметрией» по специальности 01.04.07 – «Физика
конденсированного состояния» принята к защите 26 декабря 2020 г., протокол
№ 13/19, диссертационным советом Д 002.080.03 на базе федерального
государственного бюджетного учреждения науки Институт проблем
сверхпластичности металлов» Российской академии наук, адрес: 450001, г.
Уфа, ул. Степана Халтурина, 39, приказ Министерства образования и науки РФ
о создании совета - № 785/нк от 10.07.2015 г.

Соискатель, Щербинин Степан Александрович, 1986 года рождения, в
2009 г. окончил федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования «Южный федеральный университет», в 2012
г. аспирантуру того же университета, работает научным сотрудником в
Отделении сегнето-пьезоматериалов, приборов и устройств на их основе
Научно-исследовательского института физики ФГАОУ ВО «Южный
федеральный университет».

Диссертация выполнена в ФГАОУ ВО «Южный федеральный
университет», г. Ростов-на-Дону.

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, доцент Чечин Георгий Михайлович, старший научный сотрудник Научно-исследовательского института физики ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет».

Официальные оппоненты:

1. Старостенков Михаил Дмитриевич, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой «Физика» ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова».

2. Еникеев Нариман Айратович, доктор физико-математических наук, руководитель сектора «Моделирование объёмных наноматериалов», профессор кафедры материаловедения и физики металлов ФГБОУ ВО «Уфимский государственный авиационный технический университет»

дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация – Институт физики молекул и кристаллов - обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук (ИФМК УФИЦ РАН), г. Уфа, в своем положительном заключении, подписанном заведующим лабораторией физики атомных столкновений ИФМК УФИЦ РАН, доктором физико-математических наук Асфандиаровым Наилем Лутфурахмановичем, указала, что диссертационная работа Щербинина С.А. выполнена на актуальную тему и представляет собой законченный научно-исследовательский труд.

Соискатель имеет 25 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 8 работ, которые опубликованы в рецензируемых научных изданиях из перечня ВАК РФ и в ведущих международных журналах. Все публикации по теме диссертации написаны при непосредственном участии автора. Наиболее значительными работами являются статьи, опубликованные в журналах *Physical Review E* (2015, v. 61, 012907), *Physica Status Solidi (b)* (2019, v. 256, 1800061). В диссертации отсутствуют недостоверные данные об опубликованных соискателем научных работах.

На автореферат диссертации поступили отзывы:

1. Профессора кафедры математики, физики, информатики ФГБОУ ВО «Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет имени В.М. Шукшина», д. ф.-м.н. Захарова П.В. Отзыв положительный, без замечаний.

2. Старшего научного сотрудника ФГБУН «Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН», к.ф.-м.н. Китаева Ю.Э. Отзыв положительный, имеются замечания: 1) утверждается, что полученные результаты могут позволить верификацию феноменологических потенциалов, используемых при молекулярном моделировании, однако никакого анализа не содержится; 2) исследование динамики ННМ и их бушей в графене и алмазе проведено на достаточно малых временных интервалах, что не позволяет надёжно судить о степени их устойчивости; 3) DFT-моделирование проведено только при нулевой температуре, в связи с чем остаётся вопрос о возможности существования бушей ННМ при наличии атомных колебаний ненулевой интенсивности; 4) отсутствует обсуждение возможности исследования бушей ННМ с помощью физических экспериментов, в частности, не исследованы возможные способы возбуждения бушей в реальных кристаллах; 5) на стр. 5 и 6 структура графена названа двумерной (2D), в то время как в действительности – это трёхмерная двупериодическая система, что следовало указать при описании её симметрии на стр. 17-19. Приведенные автором группы являются слоевыми (двупериодическими трехмерными) и в их символах первая буква должна быть строчной (то есть $rbmm$, а не $Rbmm$); 6) в приведённых результатах теоретико-группового анализа молекулы SF_6 на стр. 14 не указана её точечная группа симметрии и то, какие обозначения выбраны для её неприводимых представлений.

3. Заведующего лабораторией «Математическое моделирование и информационные технологии в науке и образовании» ФГБОУ ВО «Астраханский государственный университет», д.ф.-м.н., проф. Тарасевича Ю.Ю. Отзыв положительный, имеются замечания: 1) П. П.10

Положения устанавливает, что в диссертации, имеющей теоретический характер, должны приводиться рекомендации по использованию научных выводов. Поскольку в диссертации раздел «Рекомендации» в явном виде отсутствует, соискателю желательно чётко сформулировать рекомендации в ходе публичной защиты диссертации; 2) Раздел «Цели», как мне кажется, следовало бы назвать «Задачи». Целью работы, по моему мнению, является разработка методов анализа атомных смещений в системах различной размерности при нелинейных колебаниях; 3) В разделе «Публикации» автореферата соискатель продемонстрировал ненужную скромность, не указав, что по крайней мере три работы опубликованы в журналах, индексируемых в базе данных Web of Science, включая Physical Review E (уровень Q1); 4) Несмотря на очень хорошее качество подготовки текста, избежать незначительного числа опечаток и неточностей в оформлении всё-таки не удалось (см, например, первый абзац п. 2.2. диссертации); надписи на рис. 1 автореферата микроскопические, а качество самого изображения неудовлетворительное (растр).

4. Профессора кафедры теории колебаний и автоматического регулирования ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», д.ф.-м.н. Канакова О.И. Отзыв положительный, имеются замечания: 1) Многократно употребляется словосочетание «симметрия равновесного состояния системы» в контексте, который скорее должен вместо этого подразумевать симметрию уравнений движения системы. Считаю это терминологической неточностью, поскольку, вообще говоря, возможна как первая симметрия без второй (например, решётка осцилляторов с неидентичными потенциалами, но с равновесным состоянием в виде регулярной решётки), так и вторая без первой (например, решётка осцилляторов с одинаковым двухъямным потенциалом); 2) в формулировках цели работы №2 и защищаемых положений №2 и №3 утверждается, что теоретико-групповые выводы проверяются (приближённым) численным моделированием. Поскольку указанный аналитический метод для

рассматриваемых задач является точным (не приближённым), а значит и наиболее достоверным, считаю указанные формулировки неудачными. Совпадение результатов аналитического и численного исследования в данном случае следует трактовать, наоборот, как свидетельство адекватности численной модели, основанное на соответствии её результатов качественным выводам теории; 3) В защищаемом положении №3 второе предложение «При эволюции буша...» (о направлении передачи энергии между модами) является, по-видимому, попыткой краткой формулировки теоретико-групповых правил отбора, упоминаемых в первом предложении. Поскольку эти правила отбора сами по себе не являются результатом диссертации, считаю упомянутое второе предложение не необходимым, и даже излишним, так как в силу вынужденной краткости оно не является ни математически строгим, ни физически полным (так, в реальной системе возможна передача энергии и в обратном направлении – с понижением симметрии – вследствие неустойчивости, на что сам автор указывает в другой части автореферата); 4) В главе 2, с одной стороны, и в главах 3 и 4 – с другой, термин «нелинейная мода» употребляется в разных значениях. А именно, в главе 2 так называется решение специального вида, удовлетворяющее определению (2). В главах 3 и 4 это лишь элемент базиса для представления класса решений вида (22), при этом одномодового решения, соответствующего виду (2), для конкретной моды может не существовать; 5) Пункт 3 раздела «Научная новизна» содержит словосочетание «критическая амплитуда», которое не имеет общепринятого толкования. Имелась в виду, по-видимому, амплитуда потери устойчивости; 6) Стр. 8 автореферата: «на силиконовой подложке» – очевидно, имелась в виду кремниевая подложка; 7) Стр. 12 автореферата: вопросительное предложение «Но существуют ли точные решения в гамильтоновых системах за пределами гармонического приближения?» сформулировано слишком расплывчато – разумеется, такие решения существуют, и многие классы таких решений никак не связаны с контекстом вопроса (бушами мод).

5. Профессора кафедры «Физика» ФГБОУ ВО «Ростовский государственный университет путей сообщения», д.ф.-м.н. Лагутина Б.М. Отзыв положительный, имеется замечание: автор исследовал динамику бушей колебаний различных систем на основе теории функционала плотности. Им указано, что применение указанного метода является существенным при рассмотрении ангармонических колебаний выбранных объектов. Однако, сравнение результатов, рассчитанных в рамках DFT модели, с расчётами в феноменологических потенциалах, которое показало бы особенности DFT-результатов, не приведено.

В отзывах указано, что представленная работа имеет важное научное значение и по своей новизне и актуальности соответствует требованиям ВАК к кандидатским диссертациям.

Выбор официальных оппонентов обосновывается тем, что они являются компетентными учеными-физиками, широко известны своими научными достижениями в исследовании физических систем методами моделирования и способны определить научную и практическую ценность диссертации. Выбор ИФМК УФИЦ РАН в качестве ведущей организации обоснован тем, что этот институт известен своими достижениями в области физики и имеет ученых, являющихся безусловными специалистами в физике кристаллов, в том числе нелинейных явлений в них (д.ф.-м.н. Асфандиаров Н.Л., д.ф.-м.н. Гареева З.В., к.ф.-м.н. Назаров В.Н. и др.).

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана программная реализация теоретико-групповых методов для построения симметрично-обусловленных нелинейных нормальных мод и их бушей в физических системах, описываемых как точечными, так и пространственными группами симметрии;

предложен новый подход к исследованию симметрично-обусловленных нелинейных делокализованных колебаний в кристаллах с помощью методов теории функционала плотности;

доказано существование нелинейных нормальных мод Розенберга в исследованных системах: нелинейных электрических цепочках, кристаллах графена и алмаза;

для исследования устойчивости симметрично-обусловленных нелинейных мод в электрических цепочках введены в явном виде системы малой размерности, на которые расщепляется исходная вариационная система произвольной размерности при помощи общих теоретико-групповых методов.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказано, что в монослое графена могут существовать одномерных бушей только 4, двумерных – 12, трехмерных – 1, четырехмерных – 6, а в модели, описывающей одномерную нелинейную электрическую решётку, существует только 5 симметрично-обусловленных нелинейных нормальных мод;

применительно к проблематике диссертации результативно использованы теоретико-групповые методы построения картин атомных смещений, соответствующих нелинейным нормальным модам и их бушам;

раскрыты основанные на теоретико-групповых методах алгоритмы нахождения нелинейных нормальных мод и их бушей;

изучена динамика нелинейных нормальных мод в кристаллах графена и алмаза с помощью компьютерного моделирования на основе методов теории функционала плотности;

с помощью современного языка программирования python 3 проведена модернизация созданных в 80-90-е годы прошлого века компьютерных программ, реализующих теоретико-групповые методы построения и исследования бушей мод.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработаны программы на современном языке программирования для нахождения нелинейных нормальных мод и их бушей в кристаллах, а также построения соответствующих этим динамическим объектам картин атомных смещений;

определено число бушей мод малой размерности в графене;
создана база для верификации феноменологических потенциалов, использующихся при молекулярно-динамическом моделировании в виде набора амплитудно-частотных характеристики нелинейных мод в молекуле SF₆, кристаллах графена и алмаза, рассчитанных с помощью компьютерного моделирования на основе теории функционала плотности;

представлены картины атомных смещений, соответствующие симметрично-обусловленным делокализованным колебаниям, которые могут использоваться для построения дискретных бризеров в кристаллических решетках посредством наложения на исходные динамические объекты колоколообразных локализирующих функций.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

построенные буши нелинейных нормальных мод и соответствующие им картины атомных смещений получены на основе точной теории бушей мод;

для исследования динамики найденных нелинейных объектов в молекуле SF₆ и кристаллах графена и алмаза использованы программные пакеты Quantum Espresso и ABINIT, которые являются широко используемыми в мире реализациями методов теории функционала плотности, которая зарекомендовала себя как одна из наиболее адекватных и точных теорий для расчётов кристаллов и молекул;

сама теория функционала плотности, авторы которой были удостоены Нобелевской премии, является одним из наиболее эффективных и надежных методов расчета электронной структуры и свойств материалов;

установлено совпадение полученных автором результатов с результатами из литературы там, где такое сравнение можно было провести.

Личный вклад соискателя заключается в выборе направления исследования, подготовке и проведении всех численных расчетов, результаты которых представлены в диссертации, а также в реализации комплекса программ для построения бушей нелинейных нормальных мод в

кристаллических структурах. Постановка задач, разработка плана работ и анализ полученных результатов проводились при активном участии соискателя.

На заседании 5 марта 2020 г. диссертационный совет принял решение присудить Щербинину С.А. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве «19» человек, из них «11» докторов наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния», «8» докторов наук по специальности 05.16.01 – «Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов», участвовавших в заседании, из «22» человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени – «18», против присуждения ученой степени – «0», недействительных бюллетеней – «1».

Председатель диссертационного совета

д.ф.-м.н., профессор

Ученый секретарь диссертационного совета,

д. ф.-м. н.



[Handwritten signature]
[Handwritten initials]

Мулюков Радик Рафикович

Имаев Марсель Фаниревич

5 марта 2020 г.