

«УТВЕРЖДАЮ»

Врио председателя Уфимского
федерального исследовательского центра
РАН, доктор химических наук, профессор



Мустафин А. Г. Мустафин

«13» февраля 2020 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертационную работу Щербинина Степана Александровича
«Делокализованные ангармонические колебания в системах с
дискретной симметрией»

Многие физические свойства молекул и кристаллов и их отклик на внешние воздействия не могут быть описаны в рамках линейной теории, предполагающей малость смещений атомов из положений равновесия, и возникает проблема теоретического описания существенно нелинейных колебательных режимов. В последние десятилетия, наряду с пространственно локализованными колебаниями кристаллической решетки, большой интерес вызывают делокализованные колебания, а также установление связи между этими двумя типами колебаний.

Диссертационная работа Щербинина С.А. посвящена построению делокализованных колебательных нелинейных мод в системах с дискретной симметрией с помощью теоретико-групповых методов и изучению их временной эволюции с помощью моделирования на основе теории функционала плотности, которая зарекомендовала себя как достаточно точная и адекватная теория для описания различных физических свойств кристаллических и молекулярных структур.

Актуальность работы.

17.02.20
10
от 17.02.20

Изучение нелинейных атомных колебаний молекул и кристаллов представляет значительный интерес и привлекает внимание большого числа исследователей. Поиск методов построения и анализ различных существенно нелинейных динамических режимов в молекулах и кристаллических структурах представляет собой важную задачу физики конденсированного состояния, решение которой способно повлиять на смежные разделы физики и материаловедения, чем и определяется актуальность темы диссертационной работы Щербинина С.А. Особенно актуальным представляется разработка автором нового подхода к изучению данной проблемы, основанного на синтезе теоретико-групповых методов и методов теории функционала плотности.

Характеристика содержания работы.

Введение включает описание актуальности, целей и методов исследования, новизны полученных результатов, их научной и практической значимости, положений, выносимых на защиту, сведений об апробации полученных результатов на конференциях и об опубликованных автором работах, а также о личном вкладе автора в данное исследование.

Первая глава является обзорной, в ней кратко описаны основные направления развития нелинейной динамики в XX веке, приведены примеры исследования локализованных и делокализованных колебаний в кристаллах, перечислены основные достижения в данной области. В завершении главы дан краткий обзор основных положений теории функционала плотности и её применение к моделированию атомных колебаний.

Во второй главе исследуются делокализованные моды в модели электрической цепочки нелинейных конденсаторов, связанных линейными индуктивностями. Проведено исследование устойчивости всех пяти возможных в этой системе симметрийно обусловленных нелинейных нормальных мод для случая произвольного числа электрических ячеек, в том числе стремящегося к бесконечности.

Объектом исследования *третьей главы* является молекула SF₆, которая в состоянии равновесия представляет собой правильный октаэдр, в центре которого находится атом серы, а в вершинах – атомы фтора. Было проведено моделирование с помощью методов теории функционала плотности динамики трёх колебательных мод различной симметрии, подтвердившее правила передачи возбуждения между симметрийно обусловленными нелинейными нормальными модами, которые были ранее установлены в работах ростовской научной группы с использованием теоретико-групповых представлений.

Четвертая глава посвящена исследованию делокализованных мод в графене. Автор, используя теоретико-групповые методы, построил делокализованные нелинейные колебательные моды: как те, которые могут существовать индивидуально (число таких мод оказалось равно четырём), так и те, которые за счёт межмодового взаимодействия состоят из двух, трёх и четырёх компонент. С помощью моделирования на основе теории функционала плотности были проверены теоретико-групповые выводы о взаимном возбуждении колебательных мод разной симметрии, а также рассчитаны динамические характеристики этих мод.

В пятой главе построены две нелинейные делокализованные колебательные моды для кристалла алмаза и проведено моделирование динамики этих мод с использованием методов теории функционала плотности.

Завершает работу формулировка основных результатов и выводов.

Научная новизна работы.

В диссертационной работе Щербинина С.А. впервые проведено исследование делокализованных симметрийно обусловленных нелинейных колебательных мод как с помощью теоретико-групповых методов, так и с помощью методов теории функционала плотности, а также рассчитаны их динамические характеристики. Исследование выполнено для молекулы SF₆, для монослоистого графена и алмаза.

Научная и практическая значимость работы.

В работе выполнена компьютерная реализация общей методики построения и исследования симметрийно обусловленных делокализованных нелинейных колебательных мод в системах с дискретной симметрией. Эта методика может быть использована для построения таких мод в любых молекулярных и кристаллических структурах. Такие динамические режимы представляют значительный самостоятельный научный интерес, поскольку они дают точные решения нелинейных уравнений движения атомов вне зависимости от типа межатомных взаимодействий. Кроме того, на основе делокализованных колебательных мод могут быть построены локализованные нелинейные колебательные моды – дискретные бризеры, что достигается наложением колоколообразных локализующих функций.

Результаты диссертации могут быть использованы в научных организациях и группах, занимающихся вопросами нелинейной физики материалов, в том числе, в СГУ (г. Саратов), ИФМК УФИЦ РАН (г. Уфа), ИПСМ РАН (г. Уфа), АлтГТУ (г. Барнаул) и других организациях.

Личный вклад автора состоит в реализации компьютерных программ для построения симметрийно обусловленных делокализованных нелинейных колебательных мод в исследуемых системах, в постановке и проведении всех вычислительных экспериментов, а также в анализе результатов совместно с руководителем, формулировке выводов и научных положений, выносимых на защиту.

Достоверность и обоснованность результатов.

Достоверность результатов, полученных Щербининым С.А. в его диссертационной работе, обеспечивается использованием детально разработанных ростовской исследовательской группой теоретико-групповых методов нахождения симметрийно обусловленных нелинейных динамических режимов в молекулярных и кристаллических структурах и широко используемых программных пакетов, реализующих методы теории функционала плотности. Это позволяет утверждать обоснованность и достоверность научных выводов, сделанных в диссертационной работе.

Основное содержание диссертации отражено в 8 научных публикациях в рецензируемых журналах, включенных в перечень изданий, рекомендованных ВАК РФ, 6 из которых индексируются в системе Scopus.

Замечания по диссертационной работе:

1. В работе не представлен убедительный анализ устойчивости исследованных колебательных режимов, т.к. компьютерное моделирование проведено автором только для малых временных интервалов и при нулевой температуре.

2. Отсутствует обсуждение способов возбуждения найденных динамических режимов в реальных кристаллах, а также возможных методов их обнаружения в физических экспериментах.

3. Автор обосновывает выбор методов теории функционала плотности для моделирования исследуемых динамических режимов тем, что такие методы автоматически учитывают поляризацию электронных оболочек атомов в процессе их движения и утверждает, что это оказывается существенным при рассмотрении ангармонических колебаний. В связи с этим было бы естественным провести хотя бы минимальный анализ, насколько сильно могут отличаться результаты, полученные в работе, от результатов, полученных с использованием известных феноменологических потенциалов межчастичного взаимодействия.

Высказанные замечания по диссертационной работе Щербинина С.А. представляют скорее рекомендации, касающиеся дальнейших направлений исследования и не меняют общей положительной оценки работы.

В целом, диссертация Щербинина С.А. представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, в которой изложены результаты научно обоснованных исследований. Полученные автором основные результаты являются новыми. Выводы в работе логически обоснованы и вытекают из полученных результатов. Тема исследования является актуальной, а сама работа выполнена на высоком научном уровне. Автореферат и опубликованные труды автора отражают основные положения

диссертационной работы, а результаты исследований прошли апробацию как на отечественных, так и международных конференциях.

Заключение

Диссертационная работа Щербинина Степана Александровича выполнена на актуальную тему и представляет собой законченный научно-исследовательский труд. Полученные результаты обоснованы и достоверны, имеют практическую и научную ценность.

Таким образом, диссертационная работа Щербинина С.А. «Делокализованные ангармонические колебания в системах с дискретной симметрией» соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, согласно п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г., а соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Диссертационная работа обсуждалась на научном семинаре ИФМК УФИЦ РАН 27 февраля 2019 г., протокол № 273.

Асфандиаров Наиль Лутфурахманович,
доктор физико-математических наук,
зав. лабораторией Физики атомных столкновений
Института физики молекул и кристаллов
Уфимского федерального исследовательского центра РАН,
Адрес: пр. Октября, 71, 450054, г. Уфа
E-mail: nail@anrb.ru
Тел.: +7 (347) 292-14-17

Подпись Асфандиарова Н. Л. Удостоверяю,

Главный научный секретарь УФИЦ РАН P. X. Fattakhova

