

Отзыв

официального оппонента на диссертационную работу Щербинина
Степана Александровича «Делокализованные ангармонические колебания в
системах с дискретной симметрией», представленную на соискание ученой
степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 –
«Физика конденсированного состояния»

Актуальность темы диссертационной работы.

Изучение высокоамплитудных колебаний кристаллических решёток является важной задачей физики конденсированного состояния. Нелинейный характер межатомных взаимодействий проявляется в материалах, подверженных различным типам сильного воздействия, например, деформации выше предела упругости или высокоэнергетическому излучению. Анализ ангармонических атомных колебаний позволяет объяснить целый ряд свойств кристаллических материалов: тепловое расширение, теплоёмкость, зависимость констант упругости от температуры, коэффициенты теплопроводности и т.д., в силу чего изучение существенно нелинейных атомных колебаний является актуальной задачей. Также актуальным представляется использование для исследования таких колебаний моделирования на основе теории функционала плотности, которая при расчёте кристаллических структур даёт хорошее согласие с экспериментальными данными.

Содержание диссертации

Во введении обоснована актуальность исследования делокализованных нелинейных динамических режимов в кристаллических решетках, сформулированы цели исследования, а также научные положения, выносимые на защиту. Описаны новизна и значимость результатов работы, дана информация о числе публикаций по теме диссертации, структуре и

ходящий рецензент
№ 50
от 12.01.2020

объёме диссертации, отражён личный вклад автора, указаны научные конференции, на которых докладывались результаты работы.

В первой главе приведен достаточно полный обзор литературы, посвященной исследованию нелинейных колебаний в различных системах с дискретной симметрией.

Во второй главе исследованы все пять возможных делокализованных ангармонических мод в модели электрической цепочки, состоящей из нелинейных конденсаторов, связанных линейными индуктивностями. Исследована устойчивость этих мод в зависимости от длины цепочки.

В третьей главе изучается динамика нелинейных колебательных мод и их взаимодействие в молекуле SF_6 . С помощью методов теории функционала плотности проведено исследование временной эволюции трёх мод, отличающихся симметрией, и показано, что передача возбуждения между колебательными модами рассматриваемой молекулы подчиняется правилам отбора, следующих из общей теории бушей мод, развитой в начале 90-х годов прошлого века ростовской научной группой.

В четвертой главе изучаются нелинейные делокализованные колебания решётки графена. Автором с использованием теоретико-групповых методов построены как индивидуальные нелинейные моды, так и их буши – динамические режимы, состоящие из определённого числа взаимодействующих мод. С использованием методов теории функционала плотности проведено исследование этих режимов, а также найдены амплитудно-частотные характеристики всех 4 возможных в графене индивидуальных нелинейных нормальных мод.

Пятая глава посвящена двум нелинейным делокализованным колебательным модам в кристалле алмаза. Автором построены профили атомных смещений, соответствующие этим модам, и проведено моделирование их динамики в рамках теории функционала плотности.

В заключении приведены основные результаты и сформулированы выводы по работе.

Научная новизна диссертационной работы.

С помощью теоретико-групповых методов для кристаллов графена и алмаза автором впервые получены профили атомных смещений, соответствующие делокализованным высокоамплитудным колебательным модам. Также впервые проведено исследование на основе теории функционала плотности взаимодействия нелинейных нормальных мод в молекуле SF_6 и рассчитаны их динамические характеристики.

Теоретическая и практическая значимость работы

Полученные в диссертации результаты представляют интерес для специалистов в области физики кристаллов и нелинейной динамики систем с дискретной симметрией. Зависимости частоты от амплитуды, рассчитанные в работе для делокализованных колебаний с помощью теории функционала плотности, могут применяться для верификации феноменологических потенциалов межчастичного взаимодействия, которые используются в методах молекулярного моделирования.

Достоверность и обоснованность положений и выводов диссертации вытекают из непротиворечивости полученных результатов, из представительного объёма данных численных экспериментов, проведённых с применением широко используемых в мире программных пакетов для моделирования на основе теории функционала плотности. Результаты работы прошли апробацию на всероссийских и международных конференциях и опубликованы в 8 статьях, входящих в перечень научных журналов, рекомендованных ВАК, из них 6 индексируются в системе Scopus.

Личный вклад автора состоит в создании программ для построения делокализованных высокоамплитудных колебаний в системах с дискретной симметрией, проведении расчётов методами теории функционала плотности, участии в анализе полученных данных и подготовке рукописей статей.

Замечания по диссертации

1. Во второй главе отмечено, что рассматриваемая в ней модель описывает электрическую цепочку, подобную цепочкам, реализованным некоторыми экспериментальными группами. В то же время не совсем понятно, что именно представляет собой физическая реализация таких цепочек.

2. Все исследования ангармонических динамических режимов проведены только при нулевой температуре, в работе отсутствует анализ влияния температуры на их устойчивость и время жизни.

3. Автор утверждает, что исследуемые им высокоамплитудные делокализованные динамические режимы могут влиять на свойства материалов, однако подробно не рассматривает, на какие именно.

Общая оценка диссертационной работы

Отмеченные выше недостатки не снижают общей положительной оценки диссертации Щербинина С.А., и не ставят под сомнение квалификацию автора, достоверность результатов, а также обоснованность основных выводов, полученных диссидентом.

Работа написана понятным научным языком и в целом хорошо оформлена. Основные результаты диссертации опубликованы в научных журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ, и представлены на всероссийских и международных научных конференциях. Содержание автореферата полностью соответствует содержанию диссертации.

Диссертация Щербинина С.А. "Делокализованные ангармонические колебания в системах с дискретной симметрией" выполнена на высоком научном уровне и является завершённым научно-квалификационным исследованием в области физики конденсированного состояния. По своей актуальности, научно-методическому уровню, научной новизне, достоверности и значимости полученных результатов диссертация, безусловно, соответствует п. 9 «Положения о порядке присуждения учёных

степеней», ВАК РФ и п. п. 1 и 7 паспорта специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния», а соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Я, Еникеев Нариман Айратович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой докторской диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Официальный оппонент:

Еникеев Нариман Айратович

Доктор физико-математических наук
специальностям 01.02.04 – Механика
деформируемого твёрдого тела и
01.04.07 – Физика конденсированного состояния
старший научный сотрудник,
руководитель сектора «Моделирование объёмных
наноматериалов» НИИ физики перспективных
материалов, профессор кафедры
Материаловедения и физики металлов
федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования
«Уфимский государственный
авиационный технический университет»
E-mail: nariman.enikeev@ugatu.su

Адрес: 450008, г. Уфа, ул. К. Маркса, 12

Тел.: 8 (347) 273-44-49

10 февраля 2020

