

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной и международной
деятельности ФГБОУ ВО «Алтайский
государственный технический
университет им. И.И. Ползунова»

[Signature]
А.Е. Свистула



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 диссертации

Атомные колебания большой амплитуды в кристаллах служат предметом исследования для многих работ, при этом значительная часть этих работ посвящена локализованным колебаниям. Делокализованным же колебаниям в литературе уделяется значительно меньшее внимание. Поскольку нет общей теории построения точных решений для нелинейных колебаний кристаллических решёток, нахождение симметрийно-обусловленных точных решений (бушей нелинейных нормальных мод) с использованием теоретико-групповых методов, осуществлённое в диссертационной работе Щербинина С.А., является актуальным. Моделирование динамики нелинейных атомных колебаний обычно проводится с помощью методов молекулярной динамики на основе

[Handwritten signature]
13.02.2020

феноменологических потенциалов межчастичного взаимодействия. Такой подход не требует значительных вычислительных ресурсов и позволяет моделировать большие (десятки и сотни тысяч атомов) фрагменты кристаллов, однако значительно уступает по точности и адекватности описания реальных физических систем гораздо более ресурсоёмкому подходу на основе теории функционала плотности (ТФП), который был применён автором в его диссертационной работе. Установление динамических свойств делокализованных нелинейных колебаний в рамках ТФП, несомненно, также является актуальной задачей нелинейной физики твердого тела и представляет интерес для широкого круга исследователей.

Структура диссертации и ее основное содержание

Диссертационная работа Щербинина С.А. состоит из введения, пяти глав, заключения и списка цитируемой литературы из 115 наименований.

Во введении обоснована актуальность научного направления исследования, изложена степень разработанности научной темы диссертации, сформулированы цели исследования, а также научные положения, выносимые на защиту. Описаны новизна, научная и практическая значимость результатов работы, дана информация о числе публикаций, структуре и объёме диссертации, отражен личный вклад автора, указаны конференции, на которых были представлены результаты диссертационной работы.

В первой главе приводится обзор литературных источников по теме диссертации: кратко описаны основные этапы развития нелинейной динамики, дано описание ключевых моментов теории функционала плотности и применения её к моделированию колебаний атомных решёток.

Вторая глава посвящена исследованию нелинейных нормальных мод (ННМ) в простой модели электрической цепочки нелинейных

ёмкостей, связанных линейными индуктивностями. С помощью специфического теоретико-группового метода проведено исследование устойчивости всех пяти возможных в такой системе симметрийно-обусловленных ННМ и при больших значениях числа узлов рассматриваемой одномерной решетки установлены законы зависимости от длины цепочки критических амплитуд этих мод, выше которых они теряют устойчивость.

В третьей главе проведено исследование динамики нелинейных нормальных мод и их взаимодействия на примере октаэдрической молекулы SF_6 с помощью моделирования на основе теории функционала плотности и показана справедливость выводов общей теории бушей мод при описании взаимодействия между нелинейными колебательными модами разной симметрии.

Четвертая глава посвящена симметрийно-обусловленным нелинейным нормальным модам и их бушам в графене. Автором были построены профили атомных смещений для бушей малой размерности в этом двумерном материале. В частности, было установлено, что в монослое графена могут существовать одномерных бушей только 4, двумерных – 12, трехмерных – 1, четырехмерных – 6. В рамках ТФП было проведено моделирование этих динамических режимов при больших амплитудах атомных смещений, вплоть до 30 процентов от межатомного расстояния.

В пятой главе найдены профили атомных смещений для двух симметрийно-обусловленных ННМ в решётке алмаза и проведено их моделирование с помощью методов теории функционала плотности для достаточно широкого диапазона амплитуд.

В заключении автором формулируются основные выводы, которые являются обоснованными и логически вытекают из проведенных в диссертационной работе исследований.

Научная новизна

Щербининым С.А. с помощью теоретико-групповых методов впервые построены симметрийно обусловленные нелинейные нормальные моды и их буши малой размерности в кристаллах графена и алмаза. Впервые проведено исследование этих динамических режимов с помощью ТФП-моделирования.

Практическая значимость работы

Результаты, полученные в диссертационной работе Щербина С.А., могут представлять интерес для исследователей динамики нелинейных систем с дискретной симметрией, в частности динамики кристаллических решёток в случае существенной их ангармоничности, а также быть использованы для построения локализованных бризерных колебаний путём наложения на делокализованную моду локализующей колоколообразной функции.

Достоверность

Достоверность результатов и основных выводов, сделанных в диссертации, обеспечивается использованием широко используемых пакетов для ТФП-расчётов ABINIT и Quantum Espresso. Основные результаты работы опубликованы в 8 статьях, входящих в список научных журналов, рекомендованных ВАК, из них 6 в научных журналах, индексируемых в Scopus.

Личный вклад автора состоит в создании комплекса программ для нахождения профилей атомных смещений, соответствующих делокализованным нелинейным колебаниями в кристаллических структурах, проведении численных экспериментов, формулировке научных положений, участии в анализе результатов и подготовке рукописей статей.

Замечания по диссертационной работе:

1. Автор утверждает, что его результаты могут позволить провести верификацию различных феноменологических потенциалов, используемых при молекулярном моделировании, но никакого обсуждения способов осуществления этого нет.
2. Исследование динамики ННМ и их бушей в графене и алмазе проведено на малых временных интервалах, что не позволяет надёжно судить об их устойчивости.
3. В главе 5 построены две нелинейные моды для алмаза, в то время как для графена таких мод четыре. В связи с этим возникает вопрос: все ли это возможные в алмазе моды? Если нет, то какое число их возможно и почему было решено ограничиться только двумя? Никаких сведений по этому поводу в диссертации не содержится.

Общая оценка диссертационной работы

В общем, диссертационная работа Щербинина С.А. представляет собой логично построенное комплексное исследование, написанное понятным и грамотным научным языком. Диссертация содержит достаточное количество графиков, иллюстраций и таблиц, помогающих пониманию ее содержания. Основные научные результаты диссертации опубликованы в отечественных и зарубежных журналах, рекомендованных ВАК, и доложены на всероссийских и международных конференциях. Содержание автореферата соответствует содержанию диссертации.

Заключение

Диссертационная работа Щербинина С.А. 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 диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук согласно п. 9 «Положение о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г., а соискатель заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Диссертационная работа и настоящий отзыв обсуждены и одобрены на расширенном научном семинаре кафедры «Общая физика» ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова».

Я, Старostenков Михаил Дмитриевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Заведующий кафедрой физики
Федерального государственного
бюджетного образовательного
учреждения высшего образования
“Алтайский государственный
технический университет им.
И.И. Ползунова”, доктор физико-
математических наук, профессор
Тел: 8 (3852) 29-08-52
E-mail: genphys@mail.ru
Адрес: 656038, г. Барнаул,
пр. Ленина, 46

М

Старostenков М. Д.

Подпись заверяю:

Михаил Ползунов

