

УТВЕРЖДАЮ:

И.о. проректора по научной  
и исследовательской деятельности  
Южного федерального университета,  
доктор химических наук

А.В. Метелица

2019 г.



### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

федерального государственного автономного образовательного  
учреждения высшего образования «Южный федеральный университет»

Диссертация «Делокализованные ангармонические колебания в системах с дискретной симметрией» выполнена в Отделении сегнетопъезоматериалов, приборов и устройств Научно-исследовательского института физики.

В период подготовки диссертации соискатель Щербинин Степан Александрович работал в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Южный федеральный университет», в Научно-исследовательском институте физики, в отделении сегнетопъезоматериалов, приборов и устройств, в должности научного сотрудника.

В 2009 г. окончил физический факультет Южного федерального университета по специальности «Физика».

Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов выдано в 2018 г. федеральным государственным автономным образовательным учреждением высшего образования «Южный федеральный университет».

**Научный руководитель** – Чечин Георгий Михайлович, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего

образования «Южный федеральный университет», Научно-исследовательский институт физики, отдел кристаллофизики, старший научный сотрудник, кандидат физико-математических наук, доцент.

По итогам обсуждения принято следующее **заключение**:

Диссертация Щербинина - С.А. является завершенной научно-исследовательской работой, которая посвящена важной проблеме физики конденсированного состояния: исследованию существенно нелинейных колебаний кристаллических решеток твердых тел.

Для анализа таких колебаний в настоящее время не существует единой строго разработанной теории. Однако можно выделить класс систем и задач, где удастся построить точные решения, основываясь на теоретико-групповом анализе систем с дискретной симметрией. Объектами исследования работы являются системы с пространственными и точечными группами симметрии. Рассмотрены нелинейные колебательные моды и их буши, описывающие межмодовые взаимодействия, в графене, алмазе и октаэдрической молекуле SF<sub>6</sub>. Для построения бушей мод использованы теоретико-групповые методы, а динамика таких режимов исследуется с помощью компьютерного моделирования на основе теории функционала плотности.

**Достоверность** результатов подтверждается надежностью указанных методов и согласием полученных автором результатов с литературными данными в тех случаях, когда такое сравнение было возможно провести. Проведенные расчеты на основе теории функционала плотности осуществлены с помощью программного пакета Quantum Espresso, который является одной из популярнейших в настоящее время реализаций методов теории функционала плотности.

**Новизна** полученных результатов определяется следующим.

В диссертационной работе **впервые** с помощью теоретико-групповых методов:

- построены все возможные в монослое графена буши нелинейных нормальных мод (ННМ) малой размерности;

- построены симметрично-обусловленные ННМ в кристалле алмаза;
- доказано, что в модели, описывающей одномерную нелинейную электрическую решетку, существует только 5 симметрично-обусловленных нелинейных нормальных мод и получены зависимости критических амплитуд этих мод от размера решетки.

Также **впервые** с помощью компьютерного моделирования на основе теории функционала плотности исследована динамика:

- бушей ННМ в молекуле  $SF_6$ ;
- бушей ННМ малой размерности в монослое графена;
- одномерных бушей ННМ в алмазе.

**Актуальность** работы определяется тем, что исследованные режимы могут влиять на различные физические свойства материалов, а также, что существует тесная связь между делокализованными нелинейными нормальными модами и локализованными модами, представляющими собой дискретные бризеры.

**Практическая значимость.** Полученные в настоящей диссертационной работе результаты представляют интерес для специалистов в области физики кристаллов и нелинейной динамики систем с дискретной симметрией. Свойства бушей колебательных нелинейных нормальных мод, рассчитанные в данной работе с помощью надежных и достаточно точных методов теории функционала плотности, могут применяться для верификации феноменологических потенциалов, используемых в молекулярной динамике, а также использоваться для построения дискретных бризеров в кристаллических решетках.

**Личный вклад** автора диссертации заключается в создании комплекса программ, реализующего теоретико-групповые методы общей теории бушей мод, для построения конкретного вида этих динамических объектов в кристаллических и молекулярных структурах, в проведении всех вычислительных экспериментов с помощью этого комплекса и с помощью моделирования на основе теории функционала плотности. Постановка задач

и анализ полученных результатов проводились совместно с научным руководителем.

Основное содержание диссертационной работы полностью изложено в 8 научных публикациях в рецензируемых журналах, включенных в перечень изданий, рекомендованных ВАК РФ, 6 из которых индексируются в системе Scopus.

Диссертация соответствует специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Диссертация «Делокализованные ангармонические колебания в системах с дискретной симметрией» Щербинина Степана Александровича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Заключение принято на заседании научного семинара Научно-исследовательского института физики Южного федерального университета.

Присутствовало на заседании 18 человек, в том числе 7 докторов и 4 кандидата физ.-мат. наук. Результаты голосования: «за» - 18 чел., «против» - нет, «воздержалось» - нет, протокол № 1 от 29.05.2019 г.

10.12.2019

Сахненко Владимир Павлович,  
доктор физико-математических наук  
по специальности 01.04.07 –  
«Физика конденсированного состояния»,  
профессор,  
Научно-исследовательский институт физики,  
отдел кристаллофизики,  
главный научный сотрудник,  
председатель заседания

Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования

ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Личную подпись

ЗАВЕРЯЮ:

Административный специалист по работе с персоналом

« 10 » 12 2019

