

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Щербинина Степана Александровича**
«Делокализованные ангармонические колебания в системах с дискретной симметрией»,
представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по
специальности **01.04.07 – физика конденсированного состояния.**

В рамках теории Ландау фазовых переходов в кристаллах различают первичные параметры порядка (ПП), ответственные за фазовый переход, и вторичные ПП, которые появляются в результате нелинейных взаимодействий между различными степенями свободы. Эти параметры порядка преобразуются по разным неприводимым представлениям исходной (высокосимметричной) группы симметрии кристалла. В 80-х годах прошлого века ростовскими физиками были разработаны теоретико-групповые методы, позволяющие для данного фазового перехода построить «полный конденсат ПП» - полный комплект параметров порядка, которые соответствуют данному понижению симметрии кристалла. В дальнейшем вышеуказанные методы были обобщены на случай динамики кристаллических решеток и привели к введению понятия бушей (кустов) нелинейных нормальных мод (ННМ) в системах с дискретной симметрией. Буш представляет собой полный комплект ННМ, обладающий определенной группой симметрии и сохраняющийся в процессе временной эволюции системы. При этом набор входящих в данный буш мод сохраняется во времени, тогда как их амплитуды изменяются в зависимости от конкретного вида межчастичных взаимодействий в системе.

Диссертационная работа С.А. Щербинина посвящена исследованию бушей ННМ малой размерности в нескольких системах с точечной и пространственной симметрией. Автором рассмотрены буши колебательных мод в молекуле SF₆, в электрической цепочке с нелинейными конденсаторами, в монослойном графене и в кристалле алмаза. Необходимо отметить, что используемые автором теоретико-групповые методы позволили ему найти в этих объектах все возможные симметрийно-обусловленные ННМ, а в графене и молекуле SF₆ также их двумерные и трехмерные буши. Далее с помощью моделирования на основе теории функционала плотности (DFT) для построенных бушей автор исследует временную эволюцию входящих в них мод и, в частности, подтверждает полученные теоретико-групповые результаты, касающиеся передачи возбуждения между колебательными модами разной симметрии.

Полученные С.А. Щербининым результаты представляют значительный научный интерес, поскольку теоретико-групповое исследование не зависит от вида ангармоничности решетки, а DFT-моделирование позволяет учесть деформацию электронных оболочек атомов на квантово-механическом уровне при колебаниях большой амплитуды.

Актуальность теоретической работы автора связана с тем, что экспериментальное исследование межмодовых взаимодействий в случае существенной нелинейности атомных колебаний представляет большие технические трудности.

Диссертационная работа С.А. Щербинина не лишена ряда недостатков:

–Утверждается, что полученные результаты могут позволить верификацию различных феноменологических потенциалов, используемых при молекулярном моделировании, однако никакого анализа в работе не содержится.

– 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.

– DFT-моделирование проведено только при нулевой температуре, в связи с чем остаётся вопрос о возможности существования бушей ННМ при наличии тепловых атомных колебаний ненулевой интенсивности.

– Отсутствует обсуждение возможности исследования бушей ННМ с помощью физических экспериментов, в частности, не исследованы возможные способы возбуждения бушей в реальных кристаллах.

- На стр.5 и 6 структура графена названа двумерной (2D), в то время как в действительности – это трехмерная двупериодическая система, что следовало указать при описании ее симметрии на стр.17-19. Приведенные автором группы являются слоевыми (двупериодическими трехмерными) и в их символах первая буква должна быть строчной (то есть $r\bar{b}mm$, а не $R\bar{b}mm$).

- В приведенных результатах теоретико-группового анализа молекулы SF_6 на стр.14 не указана ее точечная группа симметрии и то, какие обозначения выбраны для ее неприводимых представлений.

Указанные замечания не снижают значимость работы автора, они скорее намечают пути дальнейших исследований. Результаты диссертации представляют существенный научный интерес. Судя по автореферату, диссертация является законченным научным трудом, выполненным на высоком научном уровне.

Диссертационная работа Щербина Степана Александровича удовлетворяет требованиям ВАК к кандидатским диссертациям, изложенным в пп. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении учёных степеней», а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности **01.04.07. – Физика конденсированного состояния.**

Я, Китаев Юрий Эруандович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Старший научный сотрудник
ФГБУН «Физико-технический институт
имени А.Ф.Иоффе РАН»,
кандидат физико-математических наук (по специальности **01.04.10 – Физика полупроводников**).
Адрес: г. Санкт-Петербург, 194021, Политехническая ул., 26,
телефон: +7(812) 292-79-94, e-mail: yu.kitaev@mail.ioffe.ru

03.02.2020



Китаев Юрий Эруандович

Хисагаева Ю.Э. удостоверяю
зав. отделом кадров ФТИ им. А.Ф. Иоффе

С.Ю. Зинецкая