

«УТВЕРЖДАЮ»

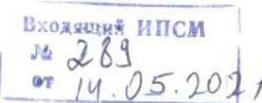
Проректор Башкирского
государственного университета по
научной и инновационной работе
Ф.М.А. на С.А.
« 30 » апреля 2021 г.

Отзыв ведущей организации

На диссертационную работу Семёновой Марии Николаевны «Свойства делокализованных нелинейных колебательных мод треугольной решетки Морзе и графена», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Актуальность темы диссертации

Активное изучение двумерных материалов, которое началось около одного десятилетия назад, привело к появлению в физике конденсированного состояния целого ряда новых направлений ввиду необычных свойств таких материалов, связанных с их размерностью. Одним из таких направлений является изучение нелинейной динамики материалов с пониженной размерностью, которая может качественно отличаться от трехмерных аналогов. Одним из наиболее известных двумерных материалов был и остается графен – материал, с которого началось интенсивное развитие направления. Уникальные свойства графена до сих пор являются объектом изучения многочисленных научных групп по всему миру, несмотря на огромное количество работ в этой области. Нужно отметить, что еще одной современной тенденцией является все более активное использование моделирования для изучения подобных материалов в силу того, что расчетные мощности, необходимые для предсказания динамики материала такими методами, постоянно растут. Среди основных методов моделирования, применяемых к таким решеткам можно выделить метод теории функционала плотности, учитывающих взаимодействие электронных облаков и ядер, и метод молекулярной динамики, основанный на интегрировании уравнений движения. Диссертационная работа Семёновой Марии Николаевны посвящена исследованию нелинейной динамики решетки графена, а также двумерной треугольной решетки с потенциалом взаимодействия Морзе, методом атомистического моделирования с использованием эмпирических потенциалов взаимодействия.



Структура и основное содержание работы

Диссертация изложена на 108 страницах, состоит из введения, четырех глав, заключения, приложения и списка литературы из 122 наименований.

Во введении приведено обоснование актуальности темы диссертационного исследования – нелинейных колебаний решеток с пониженной размерностью, приведены последние достижения в данной области исследования, обоснован выбор методологии и объекта исследования, представлены цели и задачи работы, сформулирована научная новизна и научно-практическая значимость полученных результатов, сформулированы положения, выносимые на защиту, приведены данные об апробации работы. Приведено описание списка публикаций автора, в которых отражено основное содержание диссертации. Список включает 13 печатных работ, из них 7 статей в журналах из списка ВАК, 5 работ в журналах, индексируемых в Web of Science и Scopus, одна из которых в журнале второго квартриля (Q2).

В первой главе приведен обзор литературы по направлению диссертационной работы. Приведены основные данные о линейных и нелинейных колебаниях кристаллических решеток, типов возбуждений колебаний в решетках, локализованных и делокализованных колебаниях и их взаимосвязи, перечислены экспериментальные методы исследования нелинейных колебаний, обсуждены границы их применения. Приведены основные данные о механизмах теоретико-группового расчета паттернов делокализованных нелинейных мод, реализованных группой Чечина Г.М. с соавторами, которые являются мировыми лидерами в области нахождения геометрии таких мод для кристаллических решеток различного типа и размерности. Сформулированы основные достижения в области исследования нелинейной динамики материалов с помощью численных методов. Обоснован выбор метода молекулярной динамики, описаны особенности различных межатомных потенциалов для графена. Приведена мотивация рассмотрения двумерной треугольной решетки.

В главе также приводится обзор потенциального применения полученных результатов и указаны механизмы влияния динамических нелинейных дефектов на комплекс механико-физических свойств материала.

Во второй главе описаны свойства однокомпонентных мод в треугольной двумерной решетке с потенциалом взаимодействия Морзе. Приведено описание модели, расчеты амплитудно-частотных характеристик, зависимости энергии от амплитуды моды, эволюция индуцированных нелинейными колебаниями напряжений с ростом амплитуды последних. Показано, что при не слишком больших амплитудах энергия всех

мод пропорциональна квадрату амплитуды, а при превышении определенного порога значения амплитуды имеет место отклонение от этой зависимости из-за влияния геометрической нелинейности.

В третьей главе изучены свойства одно- и двухкомпонентных делокализованных нелинейных мод в решетке графена. Исследованы четыре однокомпонентные и двенадцать двухкомпонентных мод. Под компонентами в работе подразумевается количество уравнений движения необходимых для описания паттерна моды. Показано, что однокомпонентные моды могут демонстрировать как жесткий, так и мягкий тип нелинейности в зависимости от траекторий атомов. Автором представлен также механизм инициации стабильных колебаний атомов в рамках двухкомпонентных мод путем подбора подходящего значения амплитуды второй компоненты. Отмечено, что в некоторых модах увеличение амплитуды ведет к проявлению «отрицательного давления» – растяжения ряда связей в решетке. Такое явление наблюдается в модах, паттерн движения которых ассоциирован с ротацией гексагонов.

В четвертой главе обнаружено и описано проявление генерации второй гармоники, которое наблюдается в процессе реализации всех двухкомпонентных мод. Описан физический механизм инициирования этого явления и показано, что в некоторых случаях оно может приводить к колебаниям с частотой почти в два раза выше верхней границы фононного спектра. В четвертой главе также автором реализована единственная возможная трехкомпонентная делокализованная мода и описаны ее свойства.

В заключении сформулировано одиннадцать выводов, которые логически следуют из анализа представленных в работе результатов.

Новизна результатов диссертационной работы

Среди новых результатов можно отметить следующие:

1. Впервые описана динамика, устойчивость и характер амплитудно-частотных зависимостей делокализованных мод в двумерной решетке с потенциалом взаимодействия Морзе.
2. Впервые проведено систематическое исследование динамики всех возможных одно-, двух- и трехкомпонентных мод в решетке графена.
3. Установлено, что реализация двух- и трехкомпонентных мод ассоциирована с точным подбором амплитуды второй компоненты, в противном случае колебания в рамках моды не становятся устойчивыми.

4. Продемонстрировано проявление отрицательного давления связанного с определенным паттерном движения мод.

Научная и практическая значимость результатов диссертационной работы

Изучение процессов локализации энергии в далеких от равновесия условиях является важным в условиях развития современных технологий, которые достаточно часто ассоциированы с высокоэнергетическими воздействиями. Понимание механизмов локализации в перспективе может быть полезным для разработки способов управления этими процессами.

Достоверность результатов исследования

Результаты, представленные в диссертации, являются достоверными, поскольку они получены методом молекулярной динамики – одним из основных инструментов явления атомного масштаба на малых временных интервалах с применением апробированных межатомных потенциалов. Полученные данные также достаточно широко представлены целевой аудитории на профильных конференциях мирового уровня и опубликованы в авторитетных профильных журналах.

Замечания по диссертации

1. В работе при моделировании динамики решетки графена автором использован межатомный потенциал Савина. При этом не приводится мотивация выбора именно этого потенциала, что вызывает вопрос в силу того, что для графена в настоящий момент существует более десятка различных межатомных потенциалов.
2. При рассмотрении нелинейной динамики решетки с потенциалом взаимодействия Морзе радиус обрезки потенциала был установлен равным пяти безразмерным единицам длины, однако в работе не приведена информация о том, насколько такая обрезка может повлиять на точность проводимых расчетов.
3. В работе не приведены аналитические выражения уравнений движения делокализованных мод.
4. В работе не объясняются значительные различия полной энергии, приходящейся на атом, от начального смещения атомов для разных делокализованных мод в треугольной решетке с потенциалом взаимодействия Морзе.

Высказанные замечания, однако, не снижают научной и практической значимости работы и ее положительной оценки.

Общая оценка диссертационной работы

В целом диссертация является законченной научно-квалификационной работой, в которой получены новые важные результаты в области нелинейной динамики решетки. Она логично построена, написана ясным языком с использованием устоявшейся терминологии. Полученные результаты хорошо апробированы и опубликованы в 7 статьях в ведущих рецензируемых журналах, входящих в Перечень ВАК Минобрнауки РФ, среди которых 5 – журналы индексируемые международными базами данных Web of Science и Scopus. Автореферат отражает основное содержание диссертации. Диссертация полностью соответствует заявленной научной специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Заключение

Считаем, что диссертационная работа «Свойства делокализованных нелинейных колебательных мод треугольной решетки Морзе и графена» соответствует требованиям пунктов 9-11, 13 и 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 "О порядке присуждения ученых степеней", предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Семёнова Мария Николаевна, заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Отзыв подготовлен доктором физико-математических наук, профессором, зав. кафедрой теоретической физики Вахитовым Робертом Миннисламовичем (научная специальность докторской диссертации 01.04.07 – Физика конденсированного состояния), обсужден и утвержден на заседании кафедры теоретической физики Башкирского государственного университета (Протокол № 6 от 28 апреля 2021 г.).

Зав. кафедрой теоретической физики
ФГБОУ ВО «Башкирский государственный
университет», доктор физико-
математических наук, профессор
Республика Башкортостан, г. Уфа,
ул. З. Валиди, 32. Тел. +7(347)2299645.
E-mail: VakhitovRM@yahoo.com
Согласен на обработку персональных данных



Р.М. Вахитов

<i>Р.М. Вахитов</i>	
Член Ученого совета государственного университета	
С.Р. Баимова	
«28» апреля	
2021 г.	