

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Корзниковой Елены Александровны "Атомистическое моделирование ангармонических возбуждений в кристаллах", представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния

Актуальность диссертационной работы Корзниковой Е.А. обусловлена тем, что в настоящее время наблюдается интенсивное развитие различных направлений нелинейной физики. Диссертация выполнена в рамках этого направления и посвящена исследованию ряда нелинейных эффектов в кристаллах методом атомистического моделирования. Нелинейные явления могут быть ответственны за ряд новых эффектов, изучение которых актуально и представляет интерес как с фундаментальной, так и практической точек зрения. Актуальность диссертационной работы обусловлена также выбранными объектами и методами исследований. Основным объектом исследования в диссертации выбраны графеновые слои и графеновые ленты, интерес к исследованию которых связан с уникальными свойствами этих наноразмерных структур. В качестве методов исследования в работе используются современные методы математического моделирования. Метод молекулярно-динамического моделирования, использованный в диссертации, позволяет пролить свет на явления малого временного и пространственного масштаба, недоступные, пока что, для экспериментального исследования. Использование этого подхода в работе позволило детально проанализировать и выявить ряд новых физических явлений, таких как локализованные нелинейные моды – дискретные бризеры, делокализованные коротковолновые фононные моды, а также решить ряд задач по нелинейной динамике графена. Последнее явление представляется крайне актуальным, ввиду того, что выполненные в диссертации исследования графеновых структур могут способствовать разработке практических приложений на их основе.

Ввиду вышесказанного можно заключить, что тема диссертационной работы Корзниковой Е.А. представляется актуальным направлением исследования как с научной, так и практической точки зрения.

Структура диссертации традиционная: диссертационная работа содержит введение, восемь глав, заключение и список литературы из 373 наименований. Структура работы обладает логическим единством. Работа изложена на 300 страницах. Каждая глава описывает решения ряд задач по физике нелинейных явлений, связанных с изучением ангармонических возбуждений в кристаллах.

В первой главе диссертации вводятся понятия об исследуемых нелинейных явлениях, а также изложены имеющиеся в литературе данные по моделированию указанных явлений. Уделено внимание проблеме выбора межатомного потенциала в зависимости от решаемой задачи. Обсуждаются открытые проблемы исследуемых аспектов нелинейной динамики материалов и, исходя из перечисленного, сформулирована цель работы.

Вторая глава диссертации посвящена методическим вопросам, а именно описаны модели и потенциалы, используемые в работе, кратко описаны основные принципы молекулярной динамики и вопрос об учете квантовых эффектов при моделировании с использованием эмпирических потенциалов.

В третьей главе приведены результаты, связанные с исследованием влияния коротковолновых делокализованных мод на нелинейную динамику и свойства кристаллов. Показано, что реализация подобных мод в материале может приводить к изменению упругих свойств материала, а при комбинировании со всесторонним растяжением материала может служить новым методом наведения ауксетизма – эффекта отрицательного коэффициента Пуассона.

Четвертая глава диссертационной работы посвящена исследованию нелинейных высокоамплитудных локализованных колебаний – дискретных бризеров в кристаллах различной размерности. Приводится сравнение

эффективности различных способов возбуждения дискретных бризеров, их возможные конфигурации, свойства и влияние жесткости решетки и эффекта размерности на свойства исследуемых объектов.

В пятой главе приводятся результаты по исследованию супратрансмиссии – явления передачи энергии по кристаллу на частотах вне фононного спектра, показан новый, отличный от ранее известных механизм передачи энергии вторично индуцированными фононами. Также описаны дискретные бризеры в листе графена, направление движения которых перпендикулярно плоскости листа.

В шестой главе описаны результаты по анализу движения дефектов краудионного типа в кристаллах. Показано, что вовлечение более чем одного атома в движение сверхзвуковых краудионов позволяет значительно повысить дальность их пробега, повышая тем самым эффективность массопереноса.

Седьмая глава посвящена исследованию статике и динамики морщин, индуцированных в упруго деформированном листе графена, обсуждается схожесть свойств различных конфигураций морщин на энергетическом уровне, что объясняется крайне низкой изгибной жесткостью листа графена.

В восьмой главе автор описывает различные объемные рулонные конфигурации графеновых нанолент, моделирование которых проводилось в самостоятельно разработанной программе. В данном разделе диссертации представлена также детализация данной модели и сравнение ее с полноатомным моделированием, которое показывает оправданность применения данной модели.

В заключении диссертации приводятся основные выводы по работе.

В диссертационной работе автором получен **ряд новых научных результатов** имеющим фундаментальное значение, наиболее важными из которых являются следующие:

- 1) На основе использования модельных потенциалов, описывающих реальное взаимодействие атомов в кристаллической решетке, найдены

- условия, при которых возможно существование дискретных бризеров в кристаллах;
- 2) Исследовано явление модуляционной неустойчивости как механизм зарождения дискретных бризеров для двумерной решетки;
 - 3) Описан новый механизм наведения аукустических свойств путем комбинации коротковолновых делокализованных мод со всесторонним растяжением решетки;
 - 4) Предложено обобщение концепции краудина и изучено влияние количества вовлеченных атомов на эффективность массопереноса;
 - 5) Выявлен новый механизм передачи энергии при воздействии на частотах вне фононного спектра кристалла;
 - 6) Исследовано аномальное поведение рулонных структур графеновых нанолент при нагревании, обладающих коэффициентом теплового расширения на два порядка превышает величину этой характеристики для алмаза.

Достоверность полученных в работе результатов подтверждается использованием хорошо апробированных методик, детальным исследованием и выбором подходящих потенциалов для каждой физической задачи, правильность которых во многом определяет результат исследования, а также сопоставлением результатов расчетов с полноатомным моделированием. Еще одним косвенным свидетельством достоверности результатов исследования является то, что они опубликованы в ведущих рецензируемых научных журналах и прошли многоуровневую экспертную оценку рецензентов, являющихся специалистами в области физики нелинейных явлений.

По диссертации Корзниковой Е.А. имеются **следующие вопросы и замечания:**

1. Какова относительная величина поправок, которая возникнет в численных значениях экспериментально измеряемых физических параметров, в случае, если изученные в работе эффекты присутствуют в исследуемых материалах,

по сравнению со значением этих же физических параметров в случае отсутствия ангармонических возбуждений?

2. Можно ли предложить схему физического эксперимента, который мог бы экспериментально подтвердить существование дискретных бризеров в изученных в диссертации системах?
3. Каковы обоснования выбора исследуемых конфигураций при моделировании статике и динамики морщин в графеновых нанолентах?
4. При рассмотрении делокализованных нелинейных мод в главе 3 автор не обосновывает их выбор и не уточняет, все ли существующие моды перечислены и рассмотрены в диссертации.
5. Восьмая глава диссертации несколько выпадает из общего контекста ввиду того, что посвящена исследованию нанорулонов графена, в то время как остальные главы описывают исследование нелинейной динамики на атомарном уровне.
6. Результаты расчетов изученных в диссертации явлений могут зависеть от вида выбранного потенциала, в связи с этим следует рекомендовать автору хотя бы частично повторить молекулярно-динамические расчеты не на основе молекулярно-механических потенциалов, описывающих межатомные взаимодействия, а при помощи квантово-механических *ab initio* методов.
7. В диссертации имеются технические и оформительские недочеты. Например, на странице 29 химическая формула анизотропного кристалла приведена с опечатками, аналогичная ошибка имеется на странице 30 для кристалла гелия и странице 32 для квазиодномерного ферромагнетика, на странице 211 вместо части переменных отображаются пустые прямоугольники.

Высказанные замечания ни в коей мере не снижают ценности представленной работы и не влияют на положительную оценку работы в целом. Представленная диссертация выполнена на высоком научном уровне,

является завершенной научной работой открывающей ряд новых перспективных направлений научных исследований в нелинейной физике.

Результаты диссертационной работы Корзниковой Е.А. **прошли апробацию** на различных отечественных и международных конференциях и **опубликованы** в ведущих отечественных и зарубежных журналах, входящих в перечень изданий, рекомендованных ВАК для публикации основных результатов диссертации. Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Результаты, полученные диссертантом, имеют научную и практическую значимость. С практической точки зрения результаты диссертации можно использовать при создании чувствительных графеновых сенсоров для измерения температуры. **Результаты диссертации могут быть использованы** в научных центрах и коллективах, где осуществляются экспериментальные или теоретические исследования в области динамики различных нелинейных систем, например, в МФТИ, СПбГУ, МФТИ, ИРЭ РАН, ИФМК УНЦ РАН, ИХФ РАН, АлтГТУ, ЧелГУ и других научно-исследовательских учреждениях.

Таким образом, диссертационная работа Корзниковой Е.А. «Атомистическое моделирование ангармонических возбуждений в кристаллах» является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение в области физики конденсированного состояния, связанной с исследованием нелинейной динамики кристаллических твердых тел. Сформулированные автором диссертации положения хорошо аргументированы и оценены по сравнению с другими известными решениями. Диссертация обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты и положения, свидетельствующие о личном вкладе автора диссертации в физику конденсированного состояния. Результаты диссертации

достаточно полно опубликованы в рецензируемых научных изданиях - автором опубликована 41 статья в журналах, рекомендованных ВАК РФ для публикации материалов диссертационных работ. Диссертация соответствует всем требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» к докторской диссертации, а ее автор Корзникова Елена Александровна заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент
доктор физико-математических наук,
профессор, профессор кафедры
физики конденсированного
состояния ФГБОУ ВО "Челябинский
государственный университет"

Беленков Евгений Анатольевич

Адрес: ул. Братьев Кашириных, 129,
Челябинск, Челябинская обл., Россия,
454001

Телефон: +7 351 799-71-19

Email: belenkov@csu.ru



О.В. ЖЕЛТЫШЕВА
ЗАМ. НАЧАЛЬНИКА
ОТДЕЛА КАДРОВ

