

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации «Атомистическое моделирование ангармонических возбуждений в кристаллах», представленной Корзниковой Еленой Александровной на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Представленная работа посвящена компьютерному моделированию бризеров – пространственно-локализованных нелинейных колебательных мод в кристаллах. Автором исследовано влияние бризеров на физические свойства кристаллов; в частности, продемонстрирована возможность теплопереноса в графене в запрещённой частотной области. Особый интерес представляет предложенный универсальный способ задания начальных смещений, приводящих к возникновению бризеров. Этот способ может применяться к широкому классу кристаллов с ангармоническим межатомным взаимодействием.

Работа открывает новую область в исследовании ангармонических колебаний кристаллов. Предложенные автором методы несомненно будут использованы при дальнейшем изучении бризеров, в том числе в НИЯУ МИФИ. В то же время к автореферату имеется несколько замечаний:

- 1) Все расчёты выполнены с применением эмпирических потенциалов межатомного взаимодействия. Параметры этих потенциалов подбираются исходя из данных о равновесных состояниях и колебательных частотах атомных систем, и могут некорректно описывать ангармонизм. Было бы интересно проверить полученные результаты в рамках более строгих *ab initio* методик;
- 2) На стр. 15 автореферата на рисунке 4 приведён график зависимости параметра локализации от времени. На горизонтальной оси нанесены численные данные, но не указаны единицы измерения, что не позволяет оценить время жизни бризера;
- 3) На стр. 20-21 автореферата содержится утверждение о том, что «край графена – это по сути поверхность двумерного листа». Хотя мысль автора понятна и не вызывает возражений, приведённое утверждение в сформулированном виде противоречит устоявшейся научной терминологии: поверхностью листа считается не только его край.

Указанные недостатки несколько не снижают ценность представленной работы, посвящённой актуальной тематике и выполненной на высоком научном уровне. По нашему мнению, диссертационная работа полностью соответствует требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, а Е.А. Корзникова заслуживает присуждения учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Кандидат физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния», доцент ФГАОУ ВО Национального Исследовательского Ядерного Университета «МИФИ» (НИЯУ МИФИ)

Адрес: 115409, г. Москва, Каширское шоссе, 31

Email: KPKatin@yandex.ru

Тел.: +7(906)066-92-48

Катин Константин
Петрович

Кандидат физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния», доцент ФГАОУ ВО Национального Исследовательского Ядерного Университета «МИФИ» (НИЯУ МИФИ)

Адрес: 115409, г. Москва, Каширское шоссе, 31

Email: Mike.Maslov@gmail.com

Тел.: +7(495)788-56-99

Маслов Михаил
Михайлович

15 сентября 2017

Подпись

зам. начальника ОТД
ПО РАБОТЕ С ННП
Левченко М.И.



Маслова М.М. заверено

ВХОДЯЩИЙ ТИТМ
№ 896
от 03.10.2017