

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации *Атомистическое моделирование ангармонических возбуждений в кристаллах*, представленной **Корзниковой Еленой Александровной** на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния

Изучение ангармонических мод движения кристаллических решеток составляет актуальную и важную проблему физики твердого тела, изучению которой в последнее время уделяется большое внимание во всем мире. Работа Корзниковой Е.А. посвящена актуальной проблеме – моделированию ангармонических возбуждений в кристаллах с целью исследования динамики локализованных мод, являющихся устойчивыми решениями нелинейных дискретных уравнений. Основные результаты фундаментального характера получены автором применительно к исследованию динамики дискретных бризеров, областью приложений которых является широкий класс физических и биологических систем, эволюция которых обусловлена возбуждением коллективных мод в исходно бездефектном кристалле. Это обстоятельство в значительной степени определило, без сомнения, удачный выбор автора метода моделирования - атомистическое моделирование ангармонических возбуждений, который сопряжен с решением ряда принципиально важных задач, в том числе, поиск способов задания начальных условий, определяющих возбуждение нелинейных мод движения атомов, анализ их свойств, в том числе применительно к структуре графена. Несомненным элементом новизны, определяющим научную и прикладную значимость, является учет ван-дер-ваальсовских сил при формировании вторичных структур., что имеет важное значение для описания эффектов, наблюдаемых в структуре графена, а также биологических структур, в том числе в нелинейной динамике ДНК. Диссертация Корзниковой Е.А. вносит заметный вклад в решение целого ряда вопросов, а именно: приложение методов атомистического моделирования к изучению дискретных бризеров в кристаллах, поиск начальных условий, обеспечивающих возбуждение дискретных бризеров, анализ нелинейной динамики графена, в том числе, и вторичных структур графена, возникающих благодаря действию сил Ван-дер-Ваальса, исследование массопереноса краудидионными междоузлиями.

При рассмотрении всех вышеперечисленных проблем получены оригинальные результаты, обладающие новизной. Достоверность результатов и выводов работы сомнений не вызывает. Автореферат в целом достаточно полно отражает содержание диссертации.

Отмечу лишь, что работу следовало бы насытить более глубокой физической интерпретацией полученных результатов применительно к динамике нелинейных систем, в том числе графена и, возможно, биологических систем. В частности, можно обратить внимание

Входящий ИИИМ
№ 897
от 03.10.2017

автора на возможность применения развитых методов атомистического моделирования к исследованию нелинейной динамики ДНК, в том числе, в развитие известных моделей (Peugard-Bishop model), в которых впервые установлена определяющая роль дискретных бризеров в механизмах денатурации ДНК. Данное замечание следует воспринимать как пожелание, оно не изменяет общей положительной оценки работы.

Результаты диссертационной работы опубликованы в изданиях с высоким научным рейтингом, обсуждались на международных конференциях и семинарах.

Считаю, что диссертационная работа Корзниковой Елены Александровны удовлетворяет всем требованиям ВАК, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, а её автор заслуживает присвоения искомой степени по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Наймарк Олег Борисович

Доктор физико- математических наук,
Профессор,
Заведующий лабораторией Физических основ прочности
Института механики сплошных сред УрО РАН,
Адрес: ИМСС УрО РАН, 614013, Россия, г. Пермь,
ул. Академика Королёва, 1,
Телефон: +7 (342) 237-83-89
Факс: +7 (342) 237-84-87
E-mail: naimark@icmm.ru

