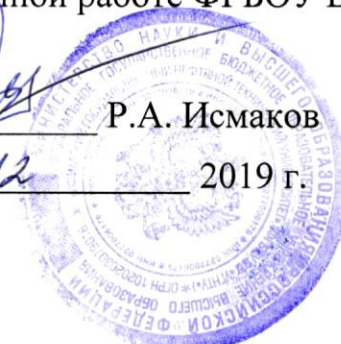


УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной и
инновационной работе ФГБОУ ВО
«УГНТУ»


_____ Р.А. Исмаков
« 09 » / 12 _____ 2019 г.



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет» (ФГБОУ ВО «УГНТУ»)

Диссертационная работа «Нелинейные пространственно локализованные колебательные моды в металлах» была выполнена на кафедре «Физика» ФГБОУ ВО «УГНТУ».

В период подготовки диссертации Бачурина О.В. работала на кафедре «Физика» ФГБОУ ВО «УГНТУ» в должности ассистента.

Соискатель Бачурина Ольга Владимировна окончила ФГБОУ ВО «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы» по специальности «Физика» в 2009 году.

Справка о сдаче кандидатских экзаменов по истории и философии науки (физико-математические науки) и иностранному языку (английский язык) выдана 07.05.2019 г. ФГБОУ ВО «БГПУ им. М. Акмуллы». В период с 16.05.2019 – 17.06.2019 года прошла обучение экстерном по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния в ФГБУН ИПСМ РАН. По итогам обучения выдана справка о сдаче кандидатского экзамена по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Научный руководитель – Дмитриев Сергей Владимирович, д.ф.-м.н., заведующий лабораторией 09 «Нелинейная физика и механика материалов» ФГБУН ИПСМ РАН.

По результатам рассмотрения диссертации «Нелинейные пространственно локализованные колебательные моды в металлах» принято следующее заключение:

Диссертация Бачуриной О.В. представляет собой законченное и самостоятельное исследование механизмов локализации колебательной энергии в кристаллических решетках ГПУ и ГЦК металлов выполненное при помощи молекулярно-динамического моделирования.

Личный вклад соискателя заключается в выборе методов решения задач, построении алгоритмов программных комплексов, проведении модельных расчетов, анализе и интерпретации результатов, формулировке выводов. Диссертация является самостоятельной работой, обобщившей результаты, полученные лично автором, либо при его непосредственном участии. Автор самостоятельно осуществлял подготовку и представление докладов по полученным результатам на научных конференциях и семинарах.

Достоверность результатов диссертации гарантируется использованием стандартных, хорошо апробированных алгоритмов метода молекулярной динамики для решения задач нелинейной динамики в кристаллических решетках различного типа и размерности. Полученные результаты всесторонне тестировались на сходимость при изменении размеров расчетной ячейки и уменьшении шага численного интегрирования уравнений движения атомов. Проводилось сопоставление результатов, полученных с использованием схем численного интегрирования различной точности. Контроль точности вычислений осуществлялся, в том числе, по точности сохранения полной энергии системы в задачах для *NVE* ансамблей. Полученные численные результаты непротиворечат базовым физическим законам и ранее опубликованным результатам по изучению нелинейной динамики модельных и реальных кристаллов.

Научная новизна работы заключается в том, что в трехмерных кристаллах могут существовать дискретные бризеры различной размерности. В ходе компьютерного моделирования установлено, что один и тот же металл допускает существование дискретных бризеров, различающихся как размерностью, так и структурой атомных колебаний. В чистых металлах

(алюминий, медь, никель) впервые возбуждены дискретные бризеры новых типов: нульмерные, одномерные и двумерные. Рассчитаны характеристики этих дискретных бризеров: зависимость частоты от амплитуды, степень пространственной локализации, время жизни, диапазон возможных энергий. С помощью методов молекулярной динамики установлено, какие из восьми делокализованных нелинейных колебательных мод двумерной треугольной решетки порождают двумерные дискретные бризеры в ГЦК и ГПУ металлах.

Научная и практическая значимость работы заключается в том, что в работе впервые показана возможность существования дискретных бризеров различной пространственной размерности с жестким типом нелинейности в трехмерных кристаллах с ГЦК и ГПУ решеткой, что развеяло существовавшее долгое время предположение о том, что такие дискретные бризеры с частотами выше фононного спектра в кристаллах с реалистичными межатомными взаимодействиями существовать не могут. Данное предположение строилось на математически обоснованном факте, что в одномерных кристаллах Морзе дискретные бризеры различной пространственной размерности действительно не существуют. Причина состоит в том, что межатомные связи проявляют мягкий тип нелинейности на больших расстояниях, где основной вклад дает взаимодействие их электронных оболочек, а на меньших расстояниях существенный вклад дает межъядерное взаимодействие, отвечающее за жесткий тип нелинейности. Для того чтобы частота дискретного бризера росла с амплитудой, необходимо обеспечить большой вклад в динамику от жесткого ядра потенциала, что невозможно для одномерной нелинейной цепочки без локального потенциала, но оказывается возможным для кристаллов более высокой размерности. Следовательно, в диссертации наглядно продемонстрировано нетривиальное значение пространственной размерности кристаллов в вопросах существования и изучения свойств дискретных бризеров. Настоящая работа стимулирует постановку экспериментальных исследований по обнаружению дискретных бризеров с жестким типом нелинейности в кристаллах с простой структурой, не имеющих щели в фононном спектре, то есть, в чистых металлах, а также исследования влияния дискретных бризеров на различные свойства материалов.

Содержание диссертационной работы соответствует специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, что подтверждается публикациями основных результатов в ведущих научных журналах по фундаментальным проблемам нелинейной динамике кристаллической решетки, апробацией работы на соответствующих научных форумах, использованными методами исследования, научной новизной и практической значимостью работы. Материалы исследования достаточно полно отражены в 9 работах, опубликованных автором по теме диссертации. Из них 4 в рецензируемых научных журналах из перечня ВАК РФ и 5 Web of Science и Scopus.

Диссертация «Нелинейные пространственно локализованные колебательные моды в металлах» Бачуриной Ольги Владимировны рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния.

Заключение принято на заседании кафедры «Физика». Присутствовало на заседании: 19 чел. Результаты голосования: «за» - 19 чел., «против» - 0 чел., «воздержались» - 0 чел., протокол № 9 от 22.05.2019 г.

Заведующий кафедрой «Физика»
Федерального государственного
бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Уфимский
государственный нефтяной технический
университет», доктор физико-
математических наук, профессор, член-
корреспондент Академии наук Республики
Башкортостан

Тел: 8 (347) 242-07-18

E-mail: phyzika@rusoil.net

Адрес: 450062, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1

Гималтдинов Ильяс Кадирович

Подпись Гималтдинова И.К. заверяю
Начальник отдела кадров



Гималтдинов И.К.



Дадаян О. А.