

РЕЗУЛЬТАТЫ

публичной защиты диссертации на соискание степени доктора наук

Соискатель: Корзникова Елена Александровна

Диссертация на тему «Атомистическое моделирование ангармонических возбуждений в кристаллах» на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния

РЕШЕНИЕ

ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.080.03

ОТ 05.10.2017 Г.

О ПРИСУЖДЕНИИ КОРЗНИКОВОЙ ЕЛЕНЕ АЛЕКСАНДРОВНЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК

На основании публичной защиты диссертации Корзниковой Елены Александровны на тему «Атомистическое моделирование ангармонических возбуждений в кристаллах», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния», диссертационный совет Д 002.080.03 тайным голосованием принял решение присудить искомую степень.

Протокол № 12/17 от 5 октября 2017 г.

На заседании присутствовали 17 членов диссертационного совета.

Председатель: член-корреспондент РАН, д. физ.-мат.наук, Мулюков Радик Рафикович.

Члены совета: д. физ.-мат.наук Назаров Айрат Ахметович, д. физ.-мат.наук Имаев Марсель Фаниревич, д. физ.-мат.наук Александров Игорь Васильевич, д. физ.-мат.наук Астанин Владимир Васильевич, д. техн.наук Валитов Венер Анварович, д. физ.-мат.наук Дмитриев Сергей Владимирович, д. техн.наук Имаев Валерий Мазитович, д. техн.наук Имаев Ренат Мазитович, д. техн.наук Корзникова Галия Фердинандовна, д. техн.наук Кузеев Искандер Рустемович, д. техн.наук Лутфуллин Рамиль Яватович, д. техн.наук Маркушев Михаил Вячеславович, д. физ.-мат.наук Мигранов Наиль Галиханович, д. физ.-мат.наук Скалдин Олег Алексеевич, д. техн.наук Утяшев Фарид Зайнуллаевич, д. физ.-мат.наук Юмагузин Юлай Мухаметович.

Результаты голосования:

за присуждение ученой степени – 16,

против присуждения ученой степени – 0,

недействительных бюллетеней – 0.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д 002.080.03



М.Ф. Имаев

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.080.03

на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук (ИПСМ РАН) по диссертации на соискание ученой степени доктора наук

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 5 октября 2017 г., протокол № 12/17

О присуждении Корзниковой Елене Александровне, гражданке РФ, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Атомистическое моделирование ангармонических возбуждений в кристаллах» по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния» принята к защите 29 июня 2017 г., протокол № 9/17, диссертационным советом Д 002.080.03 на базе ИПСМ РАН, адрес: 450001, г. Уфа, ул. Степана Халтурина, 39, Приказ Министерства образования и науки РФ о создании совета - № 785/нк от 10.07.2015 г.

Соискатель Корзникова Елена Александровна, 1983 года рождения.

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «Исследование концентрации вакансий и плотности дислокаций в ГЦК металлах после интенсивной пластической деформации» защитила в 2011 году в диссертационном совете Д 002.080.02, созданном при Учреждении Российской академии наук Институте проблем сверхпластичности металлов РАН.

Соискатель работает по трудовому договору старшим научным сотрудником в Лаборатории 04 «Нанотехнологии и наноматериалы» Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук.

Диссертация выполнена в ИПСМ РАН.

Научный консультант – доктор физико-математических наук, профессор **Дмитриев Сергей Владимирович**, ИПСМ РАН.

Официальные оппоненты:

1. **Кривцов Антон Мирославович**, член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук; заведующий кафедрой Теоретической механики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», г. Санкт-Петербург;
2. **Беленков Евгений Анатольевич**, доктор физико-математических наук; профессор; профессор кафедры Физики конденсированного состояния Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Челябинский государственный университет», г. Челябинск;
3. **Екомасов Евгений Григорьевич**, доктор физико-математических наук; профессор; профессор кафедры Теоретической физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет», г. Уфа,
дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова», г. Барнаул, в своем положительном заключении, подписанном заведующим кафедрой Высшей математики и математического моделирования, д.ф.-м.н., профессором **Полетаевым Геннадием Михайловичем** и утвержденным проректором по научно-инновационной работе, доцентом, кандидатом технических наук **Федоровым Владиславом Анатольевичем**, указала, что диссертационная работа Корзниковой Е.А. выполнена на актуальную тему и представляет собой логически выстроенную и завершенную научно-исследовательскую работу.

Соискатель имеет 109 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 43 работы, из них 43 опубликованы в рецензируемых научных изданиях из перечня ВАК РФ и ведущих международных журналах. Сорок одна публикация по теме диссертации являются научными статьями и две - свидетельствами о государственной регистрации программы для ЭВМ, написанными лично автором (либо при его непосредственном участии), их общий объём – 15 печатных листов.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. Ведущего научного сотрудника ННЦ Харьковского Физико-Технического Института, д. ф.-м. н. **Дубинко В.И.** Отзыв положительный, без замечаний.
2. Доцента Бийского технологического института (филиал) ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет», д. ф.-м. н., **Медведева Н.Н.** Отзыв положительный, имеется 1 замечание: **1.** Автор в своей работе предлагает несколько способов инициации дискретных бризеров в молекулярно-динамических расчетах, при этом не упоминая каким образом возможно их зарождение в реальных условиях.
3. Заведующего кафедрой общей и экспериментальной физики Алтайского государственного университета, д. ф.-м. н., профессора **Плотникова В.А.** Отзыв положительный, имеется 1 замечание: **1.** В работе рассматриваются по существу квазибризеры, то есть объекты с конечным временем жизни. При этом не приводится степень оценки квазибризерности, хотя существуют известные работы, в которых изложены методики оценки этого параметра.
4. Заведующего кафедрой прикладной физики и электроники, декана Физико-технического факультета Алтайского государственного университета, д. ф.-м. н., профессора **Полякова В.В.** Отзыв положительный, без замечаний.
5. Доцента кафедры физики конденсированных сред Национального исследовательского Ядерного университета «МИФИ», к. ф.-м. н. **Катина К.П.**, доцента кафедры физики конденсированных сред Национального

Исследовательского Ядерного Университета «МИФИ», к. ф.-м. н. **Маслова М.М.** Отзыв положительный, имеется 3 замечания: **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.

6. Старшего научного сотрудника АНО Научно-исследовательского института Проблем развития научно-образовательного потенциала молодёжи, исследователя Университета Гренобля (Франция), Ph.D. (нанопизика) **Прудковского В.С.** Отзыв положительный, имеется 2 замечания: **1.** Недостаточное внимание уделено вопросу о способах возбуждения нелинейных мод в реальных системах, позволяющих экспериментально проверить описанные результаты. **2.** При оформлении списка литературы допущена небрежность: в ссылке 26 не указан год опубликования статьи.

7. Профессора кафедры физики и нелинейной динамики Саратовского национального исследовательского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского, д. ф.-м. н., профессора **Четверикова А.П.** Отзыв положительный, имеется 3 замечания: **1.** Ради исторической справедливости, стоит отметить, что понятие солитона возникло не в середине прошлого века (стр. 3), а

введено Дж.С. Расселом веком ранее. **2.** Утверждение, что рулоны графеновых нанолент имеют коэффициент радиального теплового расширения на два порядка больше, чем алмаз (стр. 32), кажется чересчур категоричным без экспериментального подтверждения данных компьютерного эксперимента. **3.** Утверждение, что эффективным способом возбуждения дискретных бризеров является наложение локализирующей функции на ДНК (стр. 31), относится лишь к сфере компьютерного эксперимента – проблему как их возбуждать в реальном кристалле еще предстоит решать.

8. Ведущего научного сотрудника лаборатории Механики жидкостей ФГБУН Института проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, проф. д.ф.-м.н. **Городцова В.А.**, старшего научного сотрудника лаборатории Механики прочности и разрушения материалов и конструкций ФГБУН Института проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, к.ф.-м.н. **Лисовенко Д.С.** Отзыв положительный, имеется 1 замечание: **1.** В автореферате отсутствуют размерности на Рис. 2 (стр. 13) для модулей Юнга E , частот мод ω , осредненных за период энергий в расчете на частицу $\langle e \rangle$, осредненных за период напряжений $\langle \sigma_{xx} \rangle$, $\langle \sigma_{yy} \rangle$ (в основном в тексте автореферата они также отсутствуют).

9. Заведующего лабораторией Физических основ прочности Института механики сплошных сред УрО РАН, профессора, д. ф.-м. н. **Наймарка О. Б.** Отзыв положительный, имеется 1 замечание: **1.** 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 автора на возможность применения развитых методов атомистического моделирования к исследованию нелинейной динамики ДНК, в том числе, в развитие известных моделей (Peyrard-Bishop model), в которых впервые установлена определяющая роль дискретных бризеров в механизмах денатурации ДНК.

В отзывах указано, что представленная работа имеет большое научное и практическое значение и по своей новизне и актуальности соответствует требованиям ВАК к докторским диссертациям.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что они являются компетентными в данной отрасли науки, широко известны своими достижениями в данной области и способны определить научную и практическую ценность диссертации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана научная концепция получения ауксетических свойств в материале, заключающаяся в использовании воздействия делокализованных нелинейных колебательных мод под гидростатическим растяжением модельной кристаллической решетки;

предложены и обоснованы механизмы возникновения дискретных бризеров в моноатомных кристаллах с реалистичными потенциалами, показана роль локального потенциала и важность размерности кристалла;

установлены и систематизированы закономерности эволюции структуры графеновых нанорулонов различных конфигураций и рассчитан коэффициент их теплового расширения с помощью предложенной автором цепной модели углеродной наноленты, которая позволяет значительно сократить использование расчетных ресурсов при моделировании объектов, состоящих из большого числа атомов;

предложено новое представление о движении дефектов краудионного типа, включающем смещения от одного до десяти атомов. При этом дальность пробега дефекта вдоль плотноупакованных рядов может быть на порядок больше по сравнению с классическим 1-краудионом.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

в работе развит ряд новых концепций, вносящих вклад в расширение представлений о физике нелинейных явлений, в частности, показан новый механизм передачи энергии по кристаллу при воздействии на частотах вне фононного спектра;

исследовано влияние делокализованных нелинейных мод на динамику кристаллической решетки и показано, в частности, что их существование в кристалле при превышении определенных амплитуд приводит к проявлению модуляционной неустойчивости и возникновению дискретных бризеров;

изложены закономерности влияния размерности кристаллической решетки на существование нелинейных локализованных колебаний посредством изменения глубины локального потенциала, который увеличивает вклад жесткого ядра межатомного потенциала в динамику решетки;

объяснен эффект появления аномально высокого коэффициента температурного расширения графеновых нанорулонов, вызванный высокой амплитудой собственной колебательной моды нанорулона в режиме "скручивание - раскручивание", что объясняется наименьшей частотой данной нормальной моды, с учетом того, что в условиях теплового равновесия, при равном распределении энергии между всеми собственными колебательными модами, наибольшую амплитуду имеет мода с наименьшей частотой;

изучен эффект взаимного перехода морщин и ринклонов в графене. Показано, что близкая к нулю изгибная жесткость обуславливает очень близкие энергетические характеристики различных объемных конфигураций морщин, что обуславливает их высокую вариабельность, то есть эволюцию без преодоления значительных потенциальных барьеров;

проведено обобщение существующего на сегодняшний день понятия краудиона до n-краудиона. Приведен анализ устойчивости движения атомов в пределах краудиона

и определены оптимальные начальные условия для максимально эффективного массопереноса посредством дефектов краудионного типа.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

изучены условия реализации дискретных бризеров в моноатомных кристаллах, что является крайне важным достижением в исследовании данного типа динамических дефектов в металлах, ввиду того, что в металлах взаимодействие дискретных бризеров с дефектами может вносить вклад в повышение вероятности совершения элементарного акта диффузии, и вследствие этого, влиять на эволюцию структуры металлов в целом.

разработана цепная модель углеродной наноленты, учитывающая изгибную и продольную жесткость графена, а также слабые ван-дер-ваальсовские взаимодействия. Данная модель позволяет эффективно описывать эволюцию различных объемных конфигураций графеновых нанолент при значительной экономии времени расчета и эффективном использовании расчетных машинных ресурсов. Ускорение процесса моделирования таких объектов является крайне важной прикладной задачей, ввиду того, что объемные углеродные наноструктуры в настоящий момент широко изучаются экспериментально и имеют большие перспективы применения в новых технологиях;

Описание новой концепции передачи энергии по кристаллу при воздействии на частотах вне фононного спектра может быть использовано при разработке новых устройств передачи энергии.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

теоретические положения работы построены на известных фактах и результатах, полученных различными методами моделирования и согласуется с данными опубликованными по теме диссертации в профильных журналах;

в молекулярно-динамическом моделировании использовались традиционные модельные потенциалы (Морзе, Леннард-Джонса, полиномиальные потенциалы), а для изучения нелинейной динамики графена использовались хорошо апробированные потенциалы Савина и AIREBO, правомерность применения которых ранее была показана многими исследователями на широком круге задач по исследованию нелинейной динамики, структуры и свойств графена;

выдвигаемые новые идеи базируются на обобщении знаний и результатов по исследованию нелинейной динамики кристаллических решеток и выявлении роли таких параметров, как размерность решетки и тип нелинейности межатомного потенциала;

использованы разработанные с участием автора программы для моделирования, на которые оформлено авторское право в виде двух свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ. При разработке цепной модели наноленты и описании с ее помощью эволюции углеродных нанорулонов и складок, автором проводилось сравнение с полноатомным молекулярно динамическим моделированием, которое показало хорошее их соответствие, что говорит о достоверности результатов, полученных в рамках упрощенной модели;

для исследования возможности и объяснения механизмов существования дискретных бризеров в моноатомных кристаллах, описываемых модельными парными потенциалами, автором был выбран потенциал Морзе, который демонстрирует наиболее мягкий тип нелинейности по сравнению с такими потенциалами, как Тоды, Борна-Майера и Леннард-Джонса. Таким образом, доказательство существования дискретных бризеров в кристаллах с потенциалом Морзе гарантирует их существование в кристаллах с другими вышеупомянутыми парными потенциалами, поскольку именно жесткость ядра потенциала является необходимым условием их существования.

Личный вклад соискателя заключается в выборе направления исследования, выработке цели исследования, постановке задач и разработке плана работ, определении круга методов молекулярно динамического моделирования и разработке моделей, необходимых и достаточных для выполнения намеченного плана, непосредственном личном участии в получении исходных данных путем проведения численных экспериментов, апробации результатов исследования, разработке необходимых методик расчетов, обработке и анализе полученных результатов с последующим оформлением в виде научных публикаций по выполненной работе и докладов на конференциях. Все этапы проведенного численного моделирования выполнены либо лично соискателем, либо при его активном непосредственном участии.

На заседании 5 октября 2017 г. диссертационный совет принял решение присудить Корзниковой Е.А. ученую степень доктора физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве «17» человек, из них «9» докторов наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния», «8» докторов наук по специальности 05.16.01 – «Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов», участвовавших в заседании, из «21» человека, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени – «16», против присуждения ученой степени – «0», недействительных бюллетеней – «0».

Председатель диссертационного совета,

д. ф.-м. н., профессор

Ученый секретарь диссертационного совета,

д. ф.-м. н.



Мулюков Радик Рафикович

Имаев Марсель Фаниревич

5 октября 2017 г.