

ОТЗЫВ

**на автореферат диссертации Семёновой Марии Николаевны на тему
«Свойства делокализованных нелинейных колебательных мод
треугольной решетки Морзе и графена», представленной на соискание
ученой степени кандидата физико-математических наук по
специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния**

Диссертационная работа Семёновой М.Н., направленная на теоретический анализ колебаний атомов в кристаллических решетках с такими высокими амплитудами, что проявляется нелинейность сил межатомного взаимодействия, обуславливающая ангармоничность колебаний, является весьма актуальной. В работе применен разработанный Г.М. Чечиним и В.П. Сахненко на основе анализа точечной симметрии кристаллической решетки остроумный метод, позволяющий, в частности, получить строгие решения для ангармонических колебаний в двумерных кристаллах. При этом не требуются значительные вычислительные мощности, как при первопринципном моделировании.

В работе проведено систематическое исследование амплитудных интервалов устойчивости однокомпонентных ДНКМ в треугольной решетке, одно-, двухкомпонентных и трехкомпонентной в графене. Выявлены моды с мягким и жестким типом нелинейности, а также моды, частоты которых выходят за верхнюю границу фононного спектра и моды с частотами, никогда не выходящими за эту границу. Рассчитаны амплитуды колебаний, при которых вне данной границы находятся частоты остальных мод.

В диссертационной работе впервые:

- показано существование амплитудного интервала устойчивости ДНКМ;
- раскрыт механизм генерации второй гармоники при возбуждении в решетках двухкомпонентных и трехкомпонентных ДНКМ;
- показано, что некоторые двухкомпонентные ДНКМ в графене могут приводить к возникновению аномального отрицательного давления при использовании периодических граничных условий с неизменной формой расчетной ячейки.

При теоретическом анализе свойств делокализованных нелинейных колебательных мод графена автор использует многочастичный межатомный

энергетический потенциал Савина, однако, к сожалению, не приводит какое-либо (аналитическое или графическое) выражение для данного потенциала, ограничиваясь литературными ссылками.

Ценность работы не умаляют встречающиеся в тексте автореферата ошибки (опечатка «остановлены» вместо «установлены» на с. 3, грамматически неправильное последнее предложение на с. 6, возможно, надо сказать «Наиболее вероятно существование бризеров...»).

Данная работа расширяет представления о нелинейной динамике двумерных решеток, что имеет как научное, так и практическое значение.

Примененные в данной работе методы молекулярной динамики могут быть развиты для анализа более сложных, чем графен, наноструктур, например гигантских молекул, включая ДНК. А это – мостик к вирусологии, где бесконечное поле для не только экспериментальных, но теоретических исследований. Например, эмпирически установлено, что на пресловутый covid-19 наиболее губительно действует ультрафиолетовое излучение характеристического спектра эксиплекса СlKг с длиной волны 222 нм, однако почему именно такое излучение особенно эффективно, понимания пока нет. Возможно, здесь найдется связь с нелинейными колебательными модами и дискретными бризерами.

Судя по автореферату, данная диссертационная работа по своей актуальности, практической ценности и научной новизне соответствует требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а ее автор, Семёнова Мария Николаевна, заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Начальник лаборатории металловедения,
канд. физ.-мат. наук



16.05.2021

В.А. Кириллов

Кириллов Владимир Анатольевич, начальник лаборатории металловедения, акционерное общество «Научно-производственный центр «Полус», 634050, Россия, г. Томск, пр. Кирова, 56 «в».

Я, Кириллов Владимир Анатольевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Подпись заверяю.
Ученый секретарь АО «НИИ «Полус»



 Л.Н. Ракова