



Министерство образования и науки
Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение
высшего образования
**«Алтайский государственный
технический университет
им. И.И. Ползунова» (АлтГТУ)**

пр-т Ленина, 46, г. Барнаул, 656038

Телефон: (3852) 29-07-10

Факс: (3852) 36-78-64

E-mail: altgtu@list.ru ;
ntsc@desert.secna.ru

№

На № от



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научно-инновационной
работе ФГБОУ ВО «Алтайский
государственный технический
университет им. И.И. Ползунова»

В.А. Федоров

«13» сентября 2017 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова» на диссертационную работу Корзниковой Елены Александровны «Атомистическое моделирование ангармонических возбуждений в кристаллах», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Актуальность проблемы

В настоящее время наблюдается повышение интереса научного сообщества к изучению эволюции структуры и механического отклика кристаллических твердых тел, обусловленных интенсивными внешними воздействиями. В связи с этим физика нелинейных явлений получает все большее значение как один из разделов физики конденсированного состояния. Атомистическое моделирование больших дискретных систем стремительно развивается, в частности, благодаря развитию соответствующей техники, что влечет за собой все новые открытия в этой области. Значительная часть нелинейных явлений, обсуждаемых в работе диссертанта, была открыта не более двух десятилетий назад, но уже внесла свой вклад в понимание эволюции структуры и нелинейной динамики кристаллов.

В диссертации можно выделить ряд изучаемых объектов, таких как явление локализация энергии в виде высокоамплитудных локализованных колебаний в дискретных системах (дискретные бризеры), коротковолновые делокализованные



колебания (буши нормальных мод), краудионные дефекты движущиеся со сверхзвуковой скоростью, которые имеют большое значение в формировании комплекса структуры и свойств кристаллов, особенно в неравновесных условиях. В настоящее время эти объекты уже достаточно активно используются при интерпретации результатов экспериментальных исследований, которые не могут быть объяснены с помощью существующего в физике конденсированного состояния понятийного аппарата.

Можно также отметить значительное количество пунктов в разделе финансовой поддержки работы от таких организаций как Российский научный фонд, Российский фонд фундаментальных исследований, Совет Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых. Вышеперечисленное говорит о том, что **актуальность диссертации** Корзниковой Е.А. не вызывает сомнений.

Работа посвящена изучению различных аспектов процесса локализации энергии в дискретных нелинейных системах различной размерности. Рассматриваются различные начальные условия для возбуждения различных типов дискретных бризеров, их возможные конфигурации, энергетические характеристики в кристаллах с универсальным потенциалом взаимодействия Морзе, а также в деформированном и недеформированном графене. Помимо этого в работе изучен вопрос самопроизвольной локализации энергии в кристалле в виде мобильных и стационарных дискретных бризеров в результате реализации делокализованных одномерных кототковолновых мод. Детально изучен новый механизм супратрансмиссии – передачи энергии на частотах вне фононного спектра кристалла, а также произведено обобщение понятия сверхзвукового краудиона.

Научная и практическая значимость результатов диссертации

В работе приведено объяснение причины существования дискретных бризеров в кристаллах с реалистичными потенциалами, которое заключается во влиянии размерности кристалла путем наложения соответствующего локального потенциала увеличивающего вклад жесткого ядра потенциала в динамику решетки. Показана возможность передачи энергии в растянутом графене при воздействии на частотах в щели XY составляющей фононного спектра. Установлено, что передача энергии может происходить даже на очень малых амплитудах воздействия путем возбуждения фононов индуцированных дискретными бризерами, амплитуда которых имеет временную модуляцию. Актуальным в прикладном смысле результатом является также разработка цепной модели наноленты которая позволяет значительно экономить машинно-расчетные ресурсы при моделировании перспективных для практических приложений рулонных упаковок графеновых нанолент.

В целом результаты, полученные в рамках диссертационного исследования имеют большую научную ценность для специалистов в области нелинейной физики.

Результаты диссертации могут быть использованы в научных организациях и группах занимающихся вопросами нелинейной физики материалов, а также разработкой теоретических основ создания новых материалов, в том числе СГУ (г. Саратов), ИФМК УНЦ РАН (г. Уфа), ЮФУ (г. Ростов на Дону) и многие другие.

Диссертация является результатом самостоятельной работы автора, представленные в ней результаты получены лично автором, либо в соавторстве.

Структура и содержание работы

Диссертация хорошо логически структурирована, состоит из введения, восьми глав, заключения и списка литературы из 373 наименований. Работа изложена на 300 страницах машинописного текста, содержит 119 рисунков и 2 таблицы.

Во введении обоснована актуальность работы, сформулированы основные цели и задачи.

Первая глава диссертации посвящена обзору литературы по исследуемым в работе направлениям нелинейной физики, анализ существующих достижений и открытых проблем.

Во второй главе обосновывается выбор подхода для моделирования дискретных атомных систем, перечислены и кратко описаны использованные потенциалы межатомного взаимодействия.

В третьей главе затрагивается вопрос о влиянии котоковолновых нормальных одномерных бушей мод на нелинейную динамику гексагональной решетки. Исследованы такие аспекты как модуляционная неустойчивость таких мод, в результате чего вся энергия системы локализуется в одном или нескольких дискретных бризерах, влияние делокализованных мод на упругие характеристики решетки. Автором проведено сравнение эволюции упругих свойств кристалла в зависимости от амплитуды колебательных мод для линейного и нелинейного случаев взаимодействия.

Исследование эффектов делокализованных мод продолжено **в четвертой главе** диссертации. В данном разделе автор описывает наложение локализующей гауссианы на делокализованные моды как способ реализации дискретных бризеров различных конфигураций в двумерных и трехмерных кристаллах с универсальным потенциалом взаимодействия Морзе. Показан эффект размерности кристалла, заключающийся в возможности реализации дискретного бризера в двумерном и трехмерном моноатомных кристаллах, в отличие от одномерного кристалла.

Пятая глава диссертации посвящена исследованию дискретных бризеров в графене. Описаны дискретные бризеры на краю листа графена, а также вариации

бризеров, направление движения которых перпендикулярно плоскости листа. Автором рассмотрен эффект супратрансмиссии на примере растянутого листа графена и показаны области ненулевой передачи энергии вдоль листа при воздействии на частотах в щели спектра с малыми амплитудами.

В шестой главе приводится анализ геометрии самофокусирующегося движения посредством столкновений на примере твердых шаров и атомов. Сформулировано условие самофокусирующегося движения атомов и предложено обобщение концепции краудиона. Обобщающая концепция предполагает распределение энергии между несколькими атомами, в результате чего эффективность массопереноса сверхзвуковыми краудионами может быть значительно повышена.

Седьмая глава посвящена исследованию морщин и складок в графене, а также рассмотрению динамики их взаимных переходов.

В восьмой главе автором представлена разработка цепной модели углеродной наноленты, которая учитывает изгибную и продольную жесткость графеновых нанолент а также слабые ван дер Ваальсовские взаимодействия. Проведен анализ собственных нелинейных колебаний рулонных структур. Описан эффект аномально высокого коэффициента теплового расширения и приведено его объяснение.

В заключении сформулированы основные результаты диссертации и выводы по работе.

Публикации и аprobация

Материалы диссертации достаточно полно опубликованы в 43 статьях в журналах, входящих в список изданий, рекомендованных ВАК РФ, аprobированы на конференциях различного уровня. Имеется 2 свидетельства о регистрации программ для ЭВМ в соавторстве.

Автореферат достаточно полно отражает содержание диссертации.

Достоверность полученных результатов

Достоверность обеспечивается хорошо зарекомендовавшим себя методом молекулярной динамики, а также использованием универсального потенциала Морзе, справедливость применения которого к описанию многих нелинейных эффектов подтверждена неоднократно. В случае решения задач связанных с нелинейной динамикой графена использовался также известный и проверенный потенциал AIREBO.

Замечания по диссертации Корзниковой Е.А.

1. Название диссертации носит слишком широкий характер. Автор исследует лишь небольшую часть нелинейных возбуждений из всего существующего спектра

2. В работе используется словосочетание «Кристалл Морзе», которое не является корректным. Такой термин в физике отсутствует.
3. Большинство физических величин в работе приводится без единиц измерения. При таком исключительно качественном подходе сложно сопоставить результаты моделирования с какими либо реальными характеристиками.
4. Метод молекулярной динамики, несмотря на его распространенность, использует эмпирические потенциалы. Ввиду малого масштаба изучаемых явлений и сравнительно небольшого количества атомов в модели часть расчетов могла быть проведена с помощью квантово-механических первоосновных методов.
5. В главе 8 при исследовании рулонных конфигураций нанолент отсутствует сравнение с экспериментальными данными, несмотря на то что подобные конфигурации являются весьма доступным объектом для экспериментальных исследований, которые представлены в мировой печати.

Указанные замечания не изменяют положительной оценки работы. Совокупность полученных автором новых результатов можно квалифицировать как научное достижение в области физики конденсированного состояния, связанное с нелинейными аспектами поведения материалов.

Представленная диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», а ее автор Корзникова Елена Александровна заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Диссертация Корзниковой Е.А. была обсуждена, и настоящий отзыв был одобрен на расширенном семинаре кафедры физики и кафедры высшей математики и математического моделирования Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова 30.08.2017.

Заведующий кафедрой высшей математики
и математического моделирования АлтГТУ,
д.ф.-м.н., профессор,
E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Тел. +7 913 236 23 65



Геннадий Михайлович Полетаев

