

## **ОТЗЫВ**

официального оппонента на диссертационную работу

Корзниковой Елены Александровны "Атомистическое моделирование ангармонических возбуждений в кристаллах", представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния

### **Актуальность проблемы**

Исследования в области физики конденсированного состояния традиционно являются основой для создания новых функциональных материалов и устройств с улучшенными или необычными физическими свойствами. Перспективным направлением, в этом отношении, является исследование нелинейных эффектов в конденсированных средах и разработке механизмов воздействия на них как общего, так специального назначения. В последние годы много ученых развивают, например, концепцию нелинейных ангармонических колебаний, которая может способствовать объяснению важных практических и фундаментально явлений и открыть новые перспективы исследований в данном направлении. Возможности экспериментального исследования в данной области имеют целый ряд ограничений по причине малого пространственного и временного масштаба изучаемых эффектов. Поэтому большая часть исследований проводится в рамках современных методов компьютерного моделирования. Они включают в себя, например, так называемый «первопринципный метод», использующий метод функционала плотности. Так же большой популярностью пользуется моделирование методом молекулярной динамики с использованием апробированных межатомных потенциалов. В поддержку использования последнего подхода служит также тот факт, что многие разрабатываемые в настоящий момент наноустройства, имеют достаточно малый масштаб и могут служить объектом для атомного моделирования.

Одним из современных материалов для разработки подобных наноустройств является графен. Это одномерный слой углерода, обладающий рядом уникальных свойств и огромной перспективой применения. К настоящему моменту времени уже имеется огромное количество работ как экспериментальных, так и теоретических, описывающих возможные использования графена и его объемных конфигураций в различных областях науки и техники. Например, его используют в качестве наноактуаторов, суперконденсаторов, высокоточных температурных сенсоров.

В связи с этим, можно отметить, что представляет как научный, так и практический интерес разработка моделей: для молекулярно-динамического моделирования нелинейных

эффектов; новых, более универсальных методов реализации локализованных нелинейных колебаний в кристаллах; анализ потенциальной роли этих колебаний в эволюции структуры кристаллов и применение их в новых технологиях. Сказанное выше, говорит о том, что тема диссертационной работы Корзниковой Е. А., посвященной изучению механизмов возбуждения различных нелинейных мод движения в молекулярно-динамических моделях кристаллов, анализу свойств этих мод и взаимосвязи между ними, с перспективой установления их роли в формировании свойств кристаллов, представляет несомненный интерес, как с научной, так и с прикладной точки зрения, является современной и актуальной.

### **Структура и содержание работы**

Диссертация состоит из введения, восьми глав, заключения и списка литературы из 373 ссылок. Работа содержит 300 страниц. Каждая оригинальная глава диссертации описывает ряд интересных исследований, объединенных общей тематикой.

В первой главе диссертации представлен литературный обзор теоретических и экспериментальных данных о рассматриваемых в работе нелинейных явлениях, в том числе дискретных бризерах, явлению модуляционной неустойчивости, супратрансмисии, делокализованных нелинейных мод и их влияния на нелинейную динамику решетки, а также ряд важных исследований по нелинейной динамике графена на различных масштабных уровнях. В главе описаны существующие достижения в этих направлениях, перечислены выявленные проблемы и сформулирована цель работы.

В второй главе описаны молекулярно-динамические модели, типы кристаллических решеток и межатомных потенциалов, использованных в работе. Представлено обоснование для выбора тех или иных межатомных потенциалов при решении различных задач поставленных в работе.

В третьей главе диссертации описаны комплексное исследование коротковолновых делокализованных нелинейных мод и анализ их влияния на свойства и динамику нелинейных решеток. Описаны такие явления как модуляционная неустойчивость, а также влияние упомянутых выше мод на упругие свойства кристалла.

В четвертой главе диссертации рассмотрены дискретные бризеры (ДБ) в двумерных и трехмерных кристаллах с потенциалом взаимодействия типа Морзе. Приведенное сравнение ключевых различий между кристаллами различного вида и размерности свидетельствует о том, что в случае использования реалистичных потенциалов, дискретные бризеры могут существовать только в двумерных и трехмерных кристаллах.

В пятой главе приводятся результаты по исследованию нелинейной динамики решетки графена, а именно дискретных бризеров и связанных с ними явлений. Описаны

несколько видов дискретных бризеров с колебаниями атомов в направлении перпендикулярном листу графена, с анализом алгоритма их реализации. Так же рассмотрен пример бризера на краю растянутого листа графена.

В шестой главе диссертации обсуждается обобщение концепции краудиона до  $n$ -краудиона, где, в отличие от классического случая, рассматривается вариант последовательного перемещения нескольких атомов, что позволяет увеличить дальность пробега данного типа дефекта кристаллической решетки.

В седьмой главе описаны виды морщин и их переходов в графене с анализом и сравнением энергетического и топологического профилей различных комбинаций морщин. Показан пример динамики переходной области объединения двух морщин.

В восьмой главе представлена разработка цепной модели углеродной наноленты, которая учитывает продольную и изгибную жесткость листа графена, а так же силы ван дер Ваальса, действующие между слоями. Модель позволяет моделировать объемные конфигурации нанолент большой длины с высокой степенью достоверности.

В заключении представлены обобщающие выводы по работе.

### **Новизна проведенных исследований и полученных результатов**

Новизна диссертационной работы заключается в разработке моделей для исследования нелинейных эффектов в кристаллах, оптимизации существующих и реализации новых способов возбуждения нелинейных колебаний в кристаллах и анализу их влияния на динамику кристаллической решетки. Можно выделить следующие наиболее важные результаты, полученные диссидентом:

1. Показана принципиальная возможность существования дискретных бризеров в кристаллах с реалистичными потенциалами и с размерностью более чем два. Дано объяснение механизма существования данного динамического дефекта.
2. Разработан новый способ реализации нелинейных локализованных колебательных мод в кристалле, основанный на локализации делокализованных коротковолновых фононных мод. Показана универсальность данного метода для кристаллов различного типа и размерности.
3. Проведено обобщение такого дефекта кристаллической решетки как «краудион» до « $n$ -краудион» и показано, что вариация параметров скорости и количества вовлеченных атомов может увеличить путь массопереноса осуществляемого «краудионом» на целый порядок величины.
4. Разработана цепная модель углеродной наноленты. Она позволяет, с высокой степенью достоверности, численно моделировать динамику и статику различных объемных конформаций графеновых нанолент большой длины, демонстрируя крайне

эффективное использование расчетных машинных ресурсов по сравнению с полноатомным моделированием.

### **Значимость результатов, полученных в диссертации, для науки и практики**

Фундаментальная научная значимость результатов работы заключается в описании и исследовании ряда новых физических явлений, таких как возможность локализации энергии в идеальном кристалле с реалистичным потенциалом, изменение упругих констант материала в процессе реализации делокализованных мод, а так же механизмы передачи энергии по кристаллу при малоамплитудных воздействиях на частотах вне спектра. Развитие этих направлений может быть крайне полезно для понимания нелинейной динамики материалов для использования в дальнейшем этих особенностей для новых практических разработок. Научно-практической ценностью обладает разработанная цепная модель углеродной наноленты. Подготовленная программа для ЭВМ позволяет значительно экономить машинное время и расчетные ресурсы при проведении моделирования этих актуальных на данный момент объектов. Государственная регистрация этой программы для ЭВМ делает ее доступной для широкого круга исследователей

### **Степень достоверности полученных результатов**

Достоверность полученных результатов, основных выводов и научных положений диссертации не вызывает сомнения. Для проведения численных расчетов применялись хорошо известные современные методы молекулярно-динамического моделирования, апробированные потенциалы взаимодействия. Автором проведено большое количество молекулярно-динамических расчетов и проверена сходимость результатов для разных размеров расчетной ячейки. Проведено сравнение полученных результатов с исследованиями в аналогичных областях. Полученные диссидентом результаты прошли широкую апробацию на профильных международных и российских конференциях, опубликованы в реферируемых журналах, признаны научным сообществом и цитируются, как российскими, так и зарубежными учеными.

### **Замечания по диссертационной работе в целом**

Сделанные в диссертационной работе научные положения, выводы и заключения достаточно обоснованы и полностью отвечают задачам исследования и полученным результатам. Однако при ознакомлении с диссертацией, возникли некоторые вопросы и замечания, на которые хотелось бы получить пояснения:

1. Применение метода молекулярной динамики предполагает, что внутреннее состояние атомов при их взаимодействии не изменяется. Как можно обосновать применение такого приближения для решаемых в диссертационной работе задач?

2. В диссертационной работе не было проведено исследование влияние коэффициента жесткости связи на свойства ДБ в трехмерных кристаллах. Т.к. вклад жесткого ядра потенциала для этого случая больше чем для двумерного, такой анализ влияния, очевидно, был бы полезен.

3. В главе 4 было бы интересным приведение сравнительных количественных оценок энергетических характеристик различных типов дискретных бризеров, в сравнении с энергиями образования и миграции различных типов дефектов кристаллической решетки. Подобное сравнение позволило бы выдвигать предположения о возможной роли ДБ в образовании и миграции дефектов в кристалле.

4. Наличие большого числа статей, написанных диссидентом, за последние шесть лет предполагает (и это видно из списка авторских работ) большое количество соавторов. В связи с этим, хотелось бы иметь более подробные сведения о разделении вклада диссидентанта и ее соавторов в полученные результаты. Например, по таким фамилиям как Баимова Ю. А. (соавтор в 11 работах) и Савин А.В. (соавтор в 6 работах).

5. Наконец, замечание по тексту и оформлению диссертации. Так, заголовок параграфа 4.2.3 «Возбуждение ДБ с использованием анзаца» является явным «жаргонизмом». Из текста параграфа следует, что «анзац – начальные условия ...», которые приведены ниже в виде формулы (4.1) и (4.2). Т.к. ДБ все-таки реальный физический объект, можно было бы предложить, для большей ясности у читателей, такой вариант заголовка «Возбуждение ДБ с помощью смещения атомов из положения равновесия в начальный момент времени».

Сделанные замечания не снижают общего хорошего впечатления от диссертации, не затрагивают сущности проделанной работы и не влияют на общую положительную оценку работы в целом.

#### **Рекомендации по использованию работы.**

Результаты диссертационной работы представляют интерес для исследователей, специализирующихся в области изучения новых материалов и их свойств. В работе есть рекомендации по выбору материалов и способу его обработки для получения нужных свойств. Можно рекомендовать результаты диссертационной работы для использования в организациях, занимающихся исследованиями двумерных и трехмерных углеродных наноструктур, гетероструктур. В частности, в их числе могут быть следующие научные организации: ИРЭ РАН, ИФМ УрО РАН, ИК РАН, ИФМК УНЦ РАН; и следующие образовательные организации: МГУ, СПбГУ, МФТИ, УрФУ, ЧелГУ, БашГУ и другие.

#### **Общая характеристика диссертационной работы**

Представленные материалы опубликованы в 43 научных публикациях в журналах из Перечня ВАК, 29 из которых, индексируются международными базами Scopus и Web of Science. Они прошли апробацию на многочисленных всероссийских и международных конференциях, симпозиумах и семинарах, хорошо известны специалистам. Автореферат полностью отражает содержание диссертации. Тема и содержание диссертационной работы соответствует заявляемой специальности.

Исходя из вышесказанного, считаю, что диссертационная работа Корзниковой Елены Александровны "Атомистическое моделирование ангармонических возбуждений в кристаллах" представляет собой законченную научно-квалификационную работу, выполненную на высоком уровне и открывающую ряд новых научных направлений в современной физике конденсированного состояния. В работе изложены новые научные результаты и представлены рекомендации по их практическому применению.

Учитывая актуальность выполненных исследований, научную новизну и научно-практическую значимость полученных результатов, считаю, что 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.

Официальный оппонент

профессор кафедры теоретической физики,  
ФГБОУ ВО Башкирский государственный  
университет

доктор физико-математических наук  Егоров Евгений Григорьевич

профессор  
ФГБОУ ВО «Башкирский государственный  
университет»,  
450076, г.Уфа, ул. З. Валиди, 32,  
тел. +7(347)229-96-45, e-mail:  
ekomasoveg@gmail.com



Пономарев Е.Г. Егоров Е.Г.  
Заверяю: научный секретарь БашГУ  
  
15 сентября 2012 г.