

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.

Интенсивное развитие методов исследования и модификации материалов на микро- и наноуровне привело к необходимости детального анализа нелинейных процессов, происходящих в кристаллических решетках иnanoструктурах. Диссертационная работа Корзниковой Е.А. направлена на изучение нелинейной динамики модельных и реальных кристаллов методами атомистического моделирования. В круг решаемых задач входит возбуждение и анализ делокализованных и пространственно локализованных колебательных мод большой амплитуды, исследование массопереноса краудионами, движущимися со сверхзвуковой скоростью, а также нелинейная динамика графена и вторичных структур на его основе. Значительный объем работы посвящен изучению дискретных бризеров — относительно новых объектов в физике конденсированного состояния. Многие задачи, рассматриваемые в работе, объединены общей идеей — это изучение механизмов локализации и транспорта энергии по кристаллической решетке. Учет нелинейных эффектов, проявляемых кристаллическими материалами в условиях интенсивных внешних воздействий, является весьма актуальной задачей, решение которой важно как с точки зрения фундаментальной науки, так и для развития современных технологий. Сказанное свидетельствует о **несомненной актуальности** темы диссертационной данной работы.

Работа содержит важные **новые результаты**, среди которых выделим следующие:

- разработан подход для получения начальных условий, позволяющих возбуждать дискретные бризеры в кристаллах;
- обнаружены новые типы дискретных бризеров в двумерных и трехмерных кристаллах Морзе;
- открыт щелевой дискретный бризер, возникающей на краю растянутой графеновой наноленты;



- показано, что возбуждение делокализованных колебательных мод в сочетании с однородным растяжением позволяет придать ауксетические свойства кристаллу;
- проведено обобщение сверхзвукового краудиона до N-краудиона, намного более эффективно переносящего межузельные атомы;
- разработана модель цепи на плоскости, эффективно моделирующей статику и динамику вторичных структур на основе графеновых нанолент; выявлен аномально высокий коэффициент радиального теплового расширения графеновых нанорулонов.

Ряд результатов имеют **прикладное значение**, например, установленный факт, что коэффициент радиального теплового расширения графеновых нанорулонов на два порядка больше, чем у алмаза, позволяет предложить создание высокочувствительных сенсоров температуры на основе нанорулонов. В перспективе, многие из новых результатов, полученных соискателем для дискретных бризеров, помогут установить их роль в формировании физических и механических свойств кристаллов.

Диссертация построена следующим образом.

Во **введении** обосновывается актуальность проведенного исследования, формулируется цель работы и перечень частных задач, решение которых необходимо для ее достижения. Перечислены новые результаты, полученные автором, и показана их практическая важность. Обоснована достоверность полученных результатов, даны сведения об апробации работы и публикациях по теме диссертации. Описаны результаты, выносимые на защиту. Даны благодарности научным фондам, при поддержке которых выполнялись исследования.

Первая обзорная глава дает достаточно полное представление о современном состоянии дел в атомистическом исследовании нелинейных колебаний кристаллических решеток. Перечислены объекты исследования в модельных и реальных кристаллических решетках, рассматриваемых в диссертационной работе. К ним относятся делокализованные нелинейные колебательные моды, дискретные бризеры, краудионы, солитоноподобные объекты в графене. Описаны экспериментальные свидетельства существования дискретных бризеров в кристаллах, а также результаты моделирования свойств дискретных бризеров, включая сценарии их взаимодействия друг с другом, с дефектами решетки, с магнитной и электронной подсистемой. Отмечено влияние упругой деформации решетки на свойства дискретных бризеров, описаны известные механизмы

возбуждения дискретных бризеров в кристаллах. Результатом представленного обсуждения известных работ стал перечень открытых проблем в изучении нелинейных возбуждений в решетках, частичному решению которых посвящена диссертационная работа Корзниковой Е.А.

Техническим вопросам применения метода молекулярной динамики для решения поставленных в работе задач посвящена **вторая глава**. Кратко представлен сам метод молекулярной динамики, описаны его основные достоинства и недостатки, вопросы программной реализации. Для каждой из задач, решаемых в последующих главах, обоснован выбор используемых межатомных потенциалов, размеров расчетных ячеек, граничных и начальных условий.

Представление оригинальных результатов, полученных автором, начинается с **третьей главы**, посвященной анализу делокализованных колебательных мод в модельной гексагональной решетке с кубическим ангармонизмом. Варьируя параметры межчастичных взаимодействий, были получены ортотропные решетки с сильно различающимися значениями коэффициентов Пуассона, отрицательными, близкими к нулю и положительными. Установлено, что все три решетки, вне зависимости от значения коэффициента Пуассона, поддерживают существование дискретных бризеров. Далее исследовано влияние делокализованных нелинейных колебательных мод на упругие характеристики изотропной гексагональной решетки. Из двух рассмотренных мод одна сохраняла, а другая нарушила упругую изотропию решетки. Как функции амплитуд мод представлены зависимости частоты, энергии, напряжений и упругих констант. Сопоставлены результаты для случаев линейных и кубически нелинейных межчастичных связей. Показано, что с ростом амплитуд мод растут модули Юнга решетки и падают коэффициенты Пуассона, не достигая, однако, отрицательных значений. В заключении рассмотрено совместное действие всестороннего растяжения решетки и возбуждения делокализованных мод, что позволило получить отрицательные значения коэффициентов Пуассона, то есть получить ауксетик. Таким образом, установлен новый механизм наведения ауксетических свойств решетки путем возбуждения в ней делокализованных нелинейных колебательных мод в сочетании со всесторонним растяжением.

Четвертая глава является одной из центральных в диссертации Корзниковой Е.А. Она посвящена доказательству существования дискретных бризеров в моноатомных

плотноупакованных кристаллах размерности 2 и 3 с межатомными взаимодействиями Морзе. Задача является нетривиальной и интересной, поскольку отсутствие дискретных бризеров в моноатомных одномерных кристаллах Морзе была строго доказана. Диссертантом развит достаточно общий подход к заданию начальных условий в молекулярно-динамических расчетах, приводящих к возбуждению дискретных бризеров в 2D и 3D кристаллах Морзе. Подход основан на анализе зависимости частоты от амплитуды коротковолновых делокализованных колебательных мод в кристаллах. Если частота моды с ростом амплитуды выходит из спектра малоамплитудных фононных колебаний, то на нее накладывается локализующая функция. Таким образом был получен ряд новых дискретных бризеров в 2D и 3D кристаллах Морзе.

В **пятой главе** изучаются нелинейные колебания решетки графена, представляющего собой двумерный гексагональный кристалл углерода. Используются реалистичные межатомные потенциалы, такие как потенциал Савина и AIREBO. Показано, что графен, моделируемый с помощью потенциалов AIREBO, поддерживает семейство дискретных бризеров с колебаниями атомов перпендикулярно листу графена. Данные бризеры были получены с помощью упомянутого выше оригинального подхода, наложением локализующей функции на делокализованную колебательную моду. Различные дискретные бризеры получаются путем центрирования локализующей функции в различных высокосимметричных точках гексагональной решетки. Следующий интересный результат – возбуждение дискретного бризера на краю растянутой графеновой наноленты. Завершается глава рассмотрением передачи энергии наноленте графена при периодическом внешнем воздействии, прикладываемом к одном зигзаг ряду атомов. Построены зависимости мощности данного источника энергии от частоты и амплитуды. Интересным результатом является обнаружение области частот возбуждения в щели фононного спектра растянутой графеновой наноленты с ненулевой мощностью источника энергии. Установлен механизм передачи энергии листу графена при данных частотах возбуждения. Он состоит в возбуждении дискретных бризеров с переменной амплитудой, которые излучают низкочастотный фонон на частоте модуляции амплитуды дискретного бризера. Показано, что данный механизм супратрансмиссии работает даже при малых амплитудах внешнего воздействия.

Шестая глава вносит существенный вклад в изучение механизмов массопереноса в кристаллах межузельными атомами, обобщая концепцию краудиона до N-краудиона, движущегося со сверхзвуковой скоростью. В N-краудионе с большой скоростью движется не один, а N атомов. Показано, что N-краудионы способны перемещать межузельные атомы на большие расстояния, имея меньшую полную энергию, чем классические краудионы. Это происходит потому, что скорость движения атомов в N-краудионе может быть меньшей, чем в 1-краудионе, что обеспечивает выполнение самофокусировки атомных столкновений.

В **седьмой главе** соискатель возвращается к изучению графена, рассматривая образование прямолинейных морщин и переходных областей, где две или три прямолинейные морщины сливаются в одну. Установлена связь между длиной волны морщины и ее потенциальной энергией. Показано, что весьма различные по топологии морщины имеют близкую энергию, объясняя тем самым высокую вариабельность морщин при незначительных внешних воздействиях. Изучено движение переходной области, соединяющей две морщины в одну.

Заключительная восьмая глава посвящена анализу вторичных структур графеновых нанолент, таких как складки, рулоны, схлопнутые рулоны и т.п. Предложена оригинальная модель цепи движущейся на плоскости, которая учитывает продольную и изгибную жесткости наноленты, а также силы Ван-дер-Ваальса, обеспечивающие устойчивость вторичных структур. Эффективность и высокая точность модели продемонстрированы путем сравнения полученных на ее основе результатов с результатами полноатомного моделирования. Установлено, что для достаточно длинных графеновых нанолент наиболее низкую энергию имеет рулонная упаковка. Найдено, что коэффициент теплового расширения рулона нанолент в радиальном направлении на два порядка больше, чем у алмаза. Дано объяснение данного эффекта на основе анализа низкочастотных собственных колебаний рулона.

Обоснованность и достоверность результатов, представленных в диссертационной работе, обеспечивается выверенной постановкой решаемых задач, использованием апробированных численных методов и межатомных потенциалов, проведением большого количества численных экспериментов, анализом влияния размера расчетной ячейки, граничных условий и других параметров моделирования на результат.

Полученные результаты физически непротиворечивы, по возможности, автор сопоставляет их с известными литературными данными.

Замечания по работе.

1. В работе исследуются достаточно тонкие нелинейные явления. Возникает вопрос – насколько повлияет на полученные результаты естественные усложнения модели, связанные с учетом: 1) теплового движения, 2) электронной подсистемы?
2. При изучении динамики гексагональной решетки с кубическим ангармонизмом учитывается взаимодействие только с атомами первой и третьей координационной сферы. Как изменились бы полученные результаты при учете взаимодействия с атомами второй координационной сферы?
3. Предложенная автором одномерная модель для анализа вынужденных колебаний графеновой наноленты допускает аналитический анализ. К сожалению, автор ограничивается только численным решением, в то время как аналитическое исследование позволило бы получить более полную информацию о динамике системы.
4. При описании методики моделирования дискретных бризеров в кристаллах Морзе ничего не сказано о радиусе обрезания потенциала.
5. В работе используется неудачный термин: “стандартный потенциал метода молекулярной динамики.” Наличие стандартов в этой области является весьма спорным вопросом.
6. На рис. 5.5 представлены амплитудно-частотные характеристики делокализованных нелинейных мод графена, полученные на основе двух потенциалов взаимодействия – Савина и AIREBO. Желателен более подробный анализ возникших сильных расхождений, а также сравнение с другими потенциалами взаимодействия. Также, желательна оценка погрешности численного расчета, использованного для получения указанных графиков.
7. В формуле (8.4) пропущены точки (дифференцирование по времени), после формулы отсутствует описание введенных в ней функций M и P .

Высказанные замечания не снижают общей положительной оценки работы и не ставят под сомнение результаты, выносимые на защиту.

Диссертация соответствует специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния, что подтверждается соответствием решаемых задач

паспорту данной специальности и публикациями результатов в профильных научных журналах. Диссертация написана хорошим литературным языком, практически отсутствуют опечатки, следует отметить подробный и качественный литературный обзор, ясность и подробность изложения методов и результатов. **Основные результаты работы опубликованы. Автореферат правильно отражает содержание диссертации.** 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,
член-корреспондент РАН,
доктор физико-математических наук
по специальности 01.02.04 «Механика деформируемого твердого тела»,
заведующий кафедрой «Теоретическая механика»
Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего
образования Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого,
почтовый адрес организации: 195251, Санкт-Петербург, Политехническая, 29,
E-mail: akrivtsov@bk.ru
Тел.: (812) 2909872

Кривцов Антон Мирославович

