

ОТЗЫВ
официального оппонента на диссертационную работу
Семёновой Марии Николаевны «Свойства делокализованных нелинейных
колебательных мод треугольной решетки Морзе и графена», представленную на
соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по
специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

В диссертационной работе Семеновой М.Н. проведено системное исследование нелинейной динамики делокализованных колебательных мод в двумерных кристаллах с различным типом решетки.

Актуальность темы исследования обусловлена тем, что в настоящий момент новые двумерные материалы находят все больше возможных применений в различных технологиях. Активное развитие таких направлений как нелинейная оптика и фотоника ассоциировано с применением материалов с пониженной размерностью – графена, дихалькогенидов переходных металлов и других систем. При этом поведение таких материалов в далеких от равновесия состояниях изучено недостаточно. Проведение исследований в данном направлении обусловлено необходимостью прогнозирования стабильности эволюции структуры и свойств двумерных кристаллов в условиях экстремальных и приближенных к ним воздействий. Автором диссертационного исследования была проведена работа по изучению далеких от равновесия систем – двумерных кристаллов с возбужденными делокализованными коротковолновыми нелинейными модами, амплитуда которых достигает нескольких процентов от межатомного расстояния. В этом случае значительную роль в динамике решетки начинает играть ангармоническая природа межатомных связей, которая зачастую приводит к существенной локализации энергии в решетке. Такая локализация в свою очередь может стать причиной появления топологических дефектов в кристалле. Проведенный в работе анализ направлен на выявление критических значений амплитуд делокализованных мод, при которых катастрофически быстро может быть потеряна устойчивость решетки. В силу сложности экспериментальной реализации подобных исследований, для проведения работы автором был использован один из наиболее распространенных и апробированных методов – атомистическое моделирование методом молекулярной динамики. Данный метод позволяет рассмотреть сценарии эволюции различных параметров структуры в достаточно длительных временных интервалах. Поэтому актуальность диссертационной работы Семеновой М.Н. связана также с использованием для решения поставленных задач современных методов компьютерных расчетов. Актуальным является также выбор



материала – графен является одним из наиболее перспективных и хорошо изученных из всех экспериментально полученных материалов с пониженной размерностью, а также является кандидатом для множества применений, связанных с интенсивными воздействиями, при которых материал находится в далеких от равновесия условиях и подвержен значительному риску потери устойчивости структуры. Рассмотрение треугольной решетки с потенциалом взаимодействия Морзе также является актуальной задачей в силу того, что существует ряд квазидвумерных материалов с аналогичной решеткой, для которых изученный в диссертации случай может быть рассмотрен как первичная модель для дальнейших исследований в области нелинейной динамики таких материалов.

Таким образом, изучение фундаментальных сценариев развития неустойчивости в далеких от равновесия состояниях в двумерных материалах является актуальной задачей физики конденсированного состояния, решение которой расширит перспективы использования этих материалов в различных отраслях техники, обеспечивающих научно-технический прогресс.

Диссертация включает в себя общую характеристику работы, главу с литературным обзором, три главы с описанием полученных результатов, заключение, выводы по работе, а также список публикаций автора и список цитируемой литературы. Работа изложена на 108 страницах и содержит 3 таблицы, 37 рисунков и 122 ссылки на литературные источники.

Первая глава представляет обзор литературных источников по теме диссертационной работы Семеновой М.Н. Глава начинается с описания особенностей линейной и нелинейной динамики кристаллической решетки, а также с рассмотрения разновидностей нелинейных колебаний в двумерных материалах. Далее приводится детальное описание методов исследования ангармонических осцилляций в кристаллах, включая экспериментальные методы и методы атомистического моделирования. Затем подробно описываются результаты экспериментальных и теоретических исследований в рассматриваемой области. На основе обзора литературных данных, в заключении главы формулируются цель и задачи диссертационной работы.

Во второй главе диссертации приведен сравнительный анализ свойств восьми однокомпонентных делокализованных нелинейных колебательных мод треугольной решетки с потенциалом взаимодействия Морзе. На основе анализа делается вывод, что только одна из возможных в данном кристалле однокомпонентных мод имеет амплитудно-частотную характеристику с частотой выше фононного спектра кристалла и модуляционная неустойчивости этой моды может привести к образованию

дискретных бризеров. Завершающий параграф второй главы диссертации посвящен анализу напряжений, создаваемых в процессе колебаний. Установлено, что три из восьми рассмотренных мод нарушают упругую изотропию треугольной решетки, так как значения напряжений в разных направлениях не идентичны, образование остальных пяти мод не нарушает изотропию решетки поскольку в этих модах сохраняется равенство обеих компонент нормальных напряжений.

Третья глава диссертационной работы посвящена описанию результатов компьютерного моделирования свойств одно-, двух- и трехкомпонентных делокализованных нелинейных мод в решетке графена. Рассмотрены амплитудно-частотные характеристики четырех однокомпонентных, двенадцати двухкомпонентных и одной трехкомпонентной моды. Глава начинается с раздела, в котором приведено описание методики моделирования изучаемых явлений, приведены размеры расчетных ячеек, даны ссылки на используемый в работе межатомный потенциал. Далее приводятся результаты расчетов некоторых физических свойств одно-, двух- и трехкомпонентных мод в устойчивом периодическом режиме для различных амплитуд рассматриваемых мод. В результате проведенных расчетов оказалось, что ни одна из рассмотренных мод не имеет амплитудно-частотную характеристику с частотой выше верхнего края фононного спектра кристалла графена. Из этого автор делает вывод, что в данной решетке с рассматриваемым потенциалом невозможно возбуждение локализованных колебаний - дискретных бризеров, возбуждаемых методом наложения функции локализации на делокализованные моды в кристаллах. В заключительном разделе третьей главы сформулированы выводы и положения, выносимые на защиту на основе приведенных в ней результатов.

В четвертой главе диссертации приводятся результаты исследования устойчивости делокализованных мод в треугольной решетке Морзе и в графене. В первом разделе описан подход к анализу устойчивости делокализованных мод и методика определения критических амплитуд. В результате расчетов автором установлено, что значение критической амплитуды делокализованных колебательных мод в треугольной решетке с потенциалом взаимодействия Морзе, выше которой колебательный процесс теряет устойчивость, для всех мод имеет порядок величины 1% от межатомного расстояния. В главе 4 также описан анализ модуляционной неустойчивости однокомпонентных мод в графене, где одна из мод демонстрирует различную динамику скорости отклонения колебаний от паттерна моды. Важной частью главы также является описание явления генерации второй гармоники, реализуемой в процессе действия двух- и трех компонентных мод.

В заключительном разделе диссертационной работы проведен анализ полученных результатов, сравнение результатов, полученных в работе, с ранее полученными аналогичными данными для других типов решеток и приведены

объяснения наблюдаемых закономерностей. На основе анализа сформулирована возможность использования рассмотренных делокализованных колебательных мод для конструирования на их основе дискретных бризеров.

Завершается диссертационная работа общими выводами по всей работе в целом, списком публикаций автора и списком цитируемой литературы.

В диссертационной работе Семеновой М.Н. получен ряд новых научных результатов, из которых наиболее важными является описание амплитудно-частотных характеристик делокализованных мод и выявление паттернов делокализованных колебаний с частотами выше верхней границы фононного спектра решетки, сценарии модуляционной неустойчивости которых допускают образование дискретных бризеров. Еще одним важным результатом научной работы автора является описание явления генерации второй гармоники в процессе колебаний двух- и трехкомпонентных делокализованных мод в графене, при этом частота второй гармоники может почти в два раза превышать максимальную частоту фононного спектра кристалла графена.

Полученные в диссертации результаты и сформулированные на их основе выводы хорошо обоснованы, и сопоставлены с теоретическими результатами других авторов.

Теоретические результаты, представленные в диссертационной работе Семеновой М.Н., имеют не только фундаментальное, но и практическое значение. С практической точки зрения новые углеродные материалы на основе графена зачастую планируются к использованию в условиях подвода значительного количества энергии: мощные короткие лазерные импульсы, интенсивные механические ударные воздействия, высокие температуры. В таких условиях амплитуда колебаний атомов в кристалле увеличивается и повышается риск потери стабильности. Рассмотрение сценариев эволюции со временем процесса колебаний атомов в далеком от равновесия состоянии вносит существенный вклад в определение границ устойчивости таких материалов.

После прочтения диссертации и автореферата возникли следующие вопросы и замечания:

1. В работе рассмотрены два вида решетки с различными эмпирическими потенциалами. Для определения роли потенциала или геометрии решетки в нелинейной динамике целесообразным представляется также исследовать либо два различных вида решетки с одним потенциалом, либо рассмотреть, например, гексагональную решетку с двумя различными потенциалами.

2. В работе не приведено объяснение, почему несколько делокализованных мод в треугольной решетке с потенциалом взаимодействия Морзе нарушают упругую изотропию треугольной решетки, в то время как остальные моды не влияют на изотропию планарного материала. Этот результат следовало бы пояснить более подробно.
3. В работе трехмерная треугольная решетка с потенциалом взаимодействия Морзе в ряде случаев названа «кристаллом Морзе», что не является общепринятым термином.
4. В работе часто упоминается о том, что делокализованные моды нужны для формирования условий для образования различных типов дискретных бризеров. Работу следовало бы дополнить примером, иллюстрирующим формирование таких динамических объектов.
5. В последнее время различные углеродные наноструктуры рассматриваются как кандидаты для применений в нанотехнологиях, при этом графен достаточно редко предлагается использовать в виде монослоя. Поэтому целесообразным представляется также исследовать многослойный материал или материал с локальным потенциалом, имитирующим многослойность, так как нелинейное поведение материала в этих условиях заведомо должно измениться.

Указанные вопросы и замечания не снижают ценность выполненной Семеновой М.Н. работы, и не ставят под сомнение сформулированные в ней выводы. Результаты диссертации хорошо обоснованы и достаточно полно опубликованы в ведущих научных журналах, рекомендованных ВАК РФ для публикации результатов диссертации, а также в зарубежных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus. Результаты диссертации представлены в 12 публикациях. Результаты апробированы на всероссийских и международных конференциях. Автореферат достаточно полно и точно отражает содержание диссертации.

Таким образом, по обоснованности и важности научных положений, сформулированных в диссертационной работе, актуальности решенных задач, достоверности и новизне результатов, диссертация Семёновой Марии Николаевны «Свойства делокализованных нелинейных колебательных мод треугольной решетки Морзе и графена» удовлетворяет всем требованиями «Положения о присуждении ученых степеней» ВАК РФ, так как содержит решения задач, связанных с исследованием физической природы нелинейной динамики двумерных кристаллов, имеющих важное значение для физики конденсированного состояния. Автор диссертации Семёнова М.Н. заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Я, Косевич Юрий Арнольдович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Официальный оппонент:

Доктор физико-математических наук по специальности

01.04.02 – Теоретическая физика

главный научный сотрудник

Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова
Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)

Адрес: 119991, Москва, ул. Косыгина, 4

Телефон: +7 (499) 137-29-51

Факс: +7 (495) 651-21-91

E-mail: yukosevich@gmail.com

Косевич

Ю. А. Косевич

«13» мая

2021 г.

Подпись Ю. А. Косевича заверяю

*Докт.
докт. физико-
по научной
9. кф.-м.н.*

